

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

FERNANDA OLIVEIRA BALBINO

**ESTIMAÇÃO DE PROPRIEDADES DINÂMICAS DE MATERIAIS
VISCOELÁSTICOS UTILIZANDO ABORDAGEM BAYESIANA**

CURITIBA

2016

FERNANDA OLIVEIRA BALBINO

**ESTIMAÇÃO DE PROPRIEDADES DINÂMICAS DE MATERIAIS
VISCOELÁSTICOS UTILIZANDO ABORDAGEM BAYESIANA**

Tese apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Doutora em Engenharia Mecânica, área de concentração em Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos, no programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Carlos Alberto Bavastri, Dr. Eng.

Coorientadores: Prof. Eduardo M. O. Lopes, PhD,

Prof. Paulo Justiniano Ribeiro Junior, PhD.

CURITIBA

2016

Balbino, Fernanda Oliveira

Estimação de propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos
utilizando abordagem bayesiana / Fernanda Oliveira Balbino . –
Curitiba, 2016.

143 f. : il.; tabs.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de
Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Orientador: Carlos Alberto Bavastri

Coorientador: Eduardo M. O. Lopes, Paulo Justiniano Ribeiro Junior

Bibliografia: p. 121-128

1. Estatística matemática. 2. Probabilidades. 3. Materiais
viscoelásticos. I. Bavastri, Carlos Alberto. II. Lopes, Eduardo M. O.
III. Ribeiro Junior Justiniano. IV. Título.

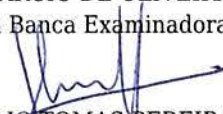
CDD 519.535

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA MECÂNICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Tese de Doutorado de **FERNANDA OLIVEIRA BALBINO**, intitulada: "**ESTIMAÇÃO DE PROPRIEDADES DINÂMICAS DE MATERIAIS VISCOELÁSTICOS UTILIZANDO ABORDAGEM BAYESIANA**", após terem inquirido a aluna e realizado a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO.

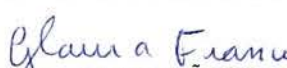
Curitiba, 23 de Setembro de 2016.


EDUARDO MARCIO DE OLIVEIRA LOPES
Presidente da Banca Examinadora (UFPR)


JUCÉLIO TOMAS PEREIRA
Avaliador Interno (UFPR)


MARCELO KAMINSKI LENZI
Avaliador Externo (UFPR)


ROBERTO DALLEDONE MACHADO
Avaliador Externo (UFPR)


GLAUCIA DA CONCEIÇÃO FRANCO
Avaliador Externo (UFMG)

Aos meus pais, Juraci e Hector Balbino.

Ao meu amor, Joel Maurício.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço a Deus, pela dádiva da vida e por me permitir esta caminhada, dando-me coragem, perseverança, saúde e, principalmente, colocando pessoas especiais ao meu lado, a começar pela família maravilhosa que tenho.

Ao professor Carlos Bavastri, pelo apoio em sua orientação.

Agradeço especialmente ao prezado professor Eduardo Lopes que, generosamente me aceitou em sua coorientação e, de forma impecável, dedicada, paciente e profissional, me supervisionou e repassou seu conhecimento durante o curso. Deixou ensinamentos que levo para a vida, como o de ser uma pesquisadora curiosa e cada dia mais ávida por conhecimento.

Ao professor coorientador Paulo Justiniano, pela inestimável colaboração ao trabalho, sempre sanando as dúvidas e disposto a ajudar.

Aos meus pais, Juraci e Hector que, com seu amor incondicional, além de sua compreensão e apoio nos momentos mais difíceis, fizeram possível a realização deste sonho. Eles sempre serão meu porto seguro.

Ao meu amor, Joel Maurício Correa da Rosa, incansável companheiro. Sem ele, a jornada não seria a mesma. Obrigada pelo seu amor, compreensão e, claro, pela sua preciosa ajuda na programação do R.

Ao meu sobrinho e afilhado, Matias, pelo amor infinito que sinto e por sua existência que alegra e dá luz a minha vida.

À minha irmã, Renata, pelo suporte do dia a dia.

Ao Davi Sidnei Lima, pelo suporte e apoio emocional, pela generosidade de seu trabalho e atendimento e por estar sempre presente em minha vida.

Aos amigos que sempre têm estado presentes, pela compreensão pelos momentos em que não pudemos estar juntos, devido à dedicação exclusiva ao projeto de doutorado. Em especial ao amigo Rafael Theodoro, pela sua ajuda habilidosa utilizando programas gráficos.

Aos colegas do laboratório LAVIBS, pela companhia e empenho nos trabalhos desenvolvidos. Em especial ao colega Thiago Silva, pela sua preciosa ajuda na instalação de programas necessários ao desenvolvimento das atividades.

Ao colega do PG-MEC, Márcio Brandani Tenório, pela sua pronta disposição em atender as solicitações necessárias no que diz respeito às questões burocráticas do programa.

A Marilda Munaro, pela atenção e colaboração na realização da parte experimental utilizada.

A CAPES/REUNI, pelo oferecimento de apoio financeiro para realização do projeto.

A Universidade Federal do Paraná, que forneceu a estrutura necessária para a realização da presente tese de doutorado.

RESUMO

Materiais viscoelásticos têm sido largamente utilizados em métodos passivos de controle de vibrações, devido à sua alta capacidade de dissipação de energia. A realização de projetos eficazes de controle de vibrações usando materiais viscoelásticos requer um conhecimento detalhado do comportamento dinâmico do material empregado. É necessário, em particular, identificar as suas propriedades dinâmicas, representadas pelo módulo real de elasticidade e seu correspondente fator de perda. Estas propriedades são obtidas através de um experimento em uma ampla faixa de temperaturas e frequências, devido à dependência das propriedades destes fatores. Trabalhos anteriores mostram que há uma significativa variabilidade nas propriedades dinâmicas. É proposta, então, abordagem bayesiana para a caracterização das propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos. Os resultados são obtidos de um experimento específico, onde amostras de um dado material foram testadas em diferentes temperaturas e frequências, gerando dados para a análise. O material é modelado, no domínio da frequência, por um modelo de derivada fracionária de quatro parâmetros. A influência da temperatura é considerada com a inclusão de modelos adicionais, a saber, o modelo descrito pela equação empírica de Williams-Landel-Ferry (WLF), com dois parâmetros e o modelo descrito pela equação teórica de Arrhenius, com um parâmetro. Para a análise bayesiana, são utilizadas distribuições a priori adequadas para os parâmetros, junto com a função de verossimilhança correspondente aos modelos empregados de modo a simular a distribuição a posteriori pelo método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC). Após a análise dos diagnósticos de cadeia, para verificar a convergência, os valores simulados são apresentados de forma gráfica. Uma verificação do modelo preditivo também é exposta para comparar os resultados associados com os dados observados. Verifica-se que esta abordagem considera a incerteza do modelo composto fornecendo uma distribuição de probabilidade para cada parâmetro contemplado.

Palavras-chave: Inferência Bayesiana. Distribuição de Probabilidade a Posteriori. Controle Passivo de Vibrações. Função de Verossimilhança. Material Viscoelástico.

ABSTRACT

Passive vibration control methods have made large use of viscoelastic materials, due to their high capacity to dissipate energy. The design of efficacious vibration control devices using viscoelastic materials requires detailed knowledge of the corresponding dynamic material behavior. That is, it is essential to identify precisely the dynamic properties, represented by the real modulus of elasticity and the associated loss factor. These properties are obtained by conducting experiments in broad ranges of temperature and frequency since the properties are dependent on these factors. Previous work demonstrated significant variability in the dynamic properties so obtained. This work proposes the use of Bayesian inference approach to characterize the dynamic properties of a typical and well-known viscoelastic material. Results obtained in a specific experiment, where samples from the material were tested at different frequencies and temperatures, generated data for the investigation. The material is initially modeled, in the frequency domain, by the four parameter fractional derivative model. The temperature influence is then considered by introducing additional models, namely the empirical William-Landel-Ferry (WLF) equation, with two parameters, and the theoretical Arrhenius equation, with one parameter. Through the Bayesian approach, adequate prior distributions are used along with a specific likelihood function for the correspondent model. The resulting posterior distributions are obtained with the aid of Monte Carlo Markov Chain (MCMC) methods. After applying diagnostics for checking the convergence of the MCMC, simulated values from the posterior distributions are presented in plots. Posterior predictive checks are carried out to assess the model goodness of fit. This framework describes model uncertainty as expected by providing successfully a probability distribution for each model parameter.

Keywords: Bayesian Inference. Posterior Probability Distribution. Passive Vibration Control. Likelihood Function. Viscoelastic Material.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – VARIAÇÃO TÍPICA DO MÓDULO REAL E DO FATOR DE PERDA COM A TEMPERATURA EM UM MATERIAL VISCOELÁSTICO TÍPICO.	27
FIGURA 2 – VARIAÇÃO TÍPICA DO MÓDULO REAL E DO FATOR DE PERDA COM A FREQUÊNCIA EM UM MATERIAL VISCOELÁSTICO TÍPICO.....	29
FIGURA 3 – CURVAS EXPERIMENTAIS DE PROPRIEDADES DINÂMICAS DE MATERIAIS VISCOELÁSTICOS EM FREQUÊNCIA E TEMPERATURA.....	32
FIGURA 4 – DIAGRAMA DE FREQUÊNCIA REDUZIDA.	33
FIGURA 5 – FATOR DE DESLOCAMENTO VERSUS TEMPERATURA.	34
FIGURA 6 – NOMOGRAMA DE FREQUÊNCIA REDUZIDA.	35
FIGURA 7 – <i>WICKET PLOT</i> (A) FORMA PADRÃO (B) FORMA USUAL.	37
FIGURA 8 – MODELOS COM MOLAS E AMORTECEDORES. (a) MAXWELL (b) KEVIN-VOIGT (c) ZENER.....	38
FIGURA 9 – MODELO DE ISOLAMENTO PASSIVO DE SISTEMA COM UM GRAU DE LIBERDADE.	44
FIGURA 10 – NOMOGRAMA DO NEOPRENE.	50
FIGURA 11 – NOMOGRAMA DA BORRACHA NATURAL.....	50
FIGURA 12 – NOMOGRAMA DO EAR C-1002.	51
FIGURA 13 – EQUIPAMENTO COM ISOLADORES AO CISALHAMENTO.	52
FIGURA 14 – MÓDULO DA TRANSMISSIBILIDADE - ISOLADORES DE NEOPRENE.	53
FIGURA 15 – MÓDULO DA TRANSMISSIBILIDADE - ISOLADORES DE BORRACHA NATURAL.	54

FIGURA 16 – MÓDULO DA TRANSMISSIBILIDADE - ISOLADORES DE EAR C-1002.....	54
FIGURA 17 – GRÁFICO DE DIAGNÓSTICO <i>TRACE PLOT</i> . (a) <i>TRACE PLOT</i> TODAS AS ITERAÇÕES (b) <i>TRACE PLOT</i> EXPANDIDO.....	72
FIGURA 18 – GRÁFICO DE DIAGNÓSTICO <i>TRACE PLOT</i> QUANDO NÃO HÁ INDICATIVO DE CONVERGÊNCIA.....	73
FIGURA 19 – GRÁFICO DE DIAGNÓSTICO <i>DENSITY PLOT</i>	74
FIGURA 20 – GRÁFICO DA ESTATÍSTICA GELMAN-RUBIN.	76
FIGURA 21 – GRÁFICO DE AUTOCORRELAÇÃO DAS CADEIAS.....	77
FIGURA 22 – NOMOGRAMA DO MATERIAL ISODAMP C-1002	86
FIGURA 23 – EQUIPAMENTO NETZSCH DMA 242C	87
FIGURA 24 – PORTA AMOSTRA DO ENSAIO DE TRAÇÃO DO NETZSCH DMA 242C.....	88
FIGURA 25 – COMPONENTES DA REGIÃO DE ENSAIO DO NETZSCH DMA 242C	88
FIGURA 26 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE – EQUAÇÃO WLF	97
FIGURA 27 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO - EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--) PREDITO (··) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.....	99
FIGURA 28 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS	101
FIGURA 29 – WICKET PLOT PARA AS MÉDIAS DOS DADOS OBSERVADOS. .	101
FIGURA 30 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EXCLUINDO FREQUÊNCIAS 50HZ E 100HZ DAS TEMPERATURAS -40°C E	

50°C – EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS	102
FIGURA 31 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE VIA BB. EQUAÇÃO WLF.....	104
FIGURA 32 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO VIA BB - EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--) PREDITO (··) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.....	106
FIGURA 33 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS VIA BB – EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS.....	108
FIGURA 34 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE - EQUAÇÃO ARRHENIUS.....	109
FIGURA 35 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO - EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--) PREDITO (··) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.....	110
FIGURA 36 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS.....	112
FIGURA 37 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EXCLUÍNDO FREQUÊNCIAS 50HZ E 100HZ DAS TEMPERATURAS -40°C E 50°C – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS	113
FIGURA 38 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE VIA BB – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS.	113

FIGURA 39 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO VIA BB - EQUAÇÃO DE
ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--)
PREDITO (··) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.....115

FIGURA 40 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS
VIA BB – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO
IMAGINÁRIO (c) VABS116

FIGURA 41 – NOMOGRAMA DE FREQUÊNCIA REDUZIDA DAS MÉDIAS
PREDITAS – EQUAÇÃO WLF118

FIGURA 42 – NOMOGRAMA DE FREQUÊNCIA REDUZIDA DAS MÉDIAS
PREDITAS – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS.....118

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA - EQUAÇÃO WLF	98
TABELA 2 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA VIA BB - EQUAÇÃO WLF	104
TABELA 3 - RESUMO DESCRITIVO COMPARATIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA E VIA BB - EQUAÇÃO WLF.	105
TABELA 4 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS	109
TABELA 5 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA VIA BB – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS.....	114
TABELA 6 - RESUMO DESCRITIVO COMPARATIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA E VIA BB - EQUAÇÃO DE ARRHENIUS	114

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

A	- Área de um elemento viscoelástico
B	- Módulo volumétrico
d	- Deflexão estática
E	- Módulo absoluto de elasticidade (ou de Young)
\bar{E}	- Módulo complexo de elasticidade (ou de Young)
E_H	- Parâmetro do material no modelo de derivadas fracionárias
E_I	- Módulo imaginário de elasticidade (ou de Young)
E_L	- Parâmetro do material no modelo de derivadas fracionárias
E_R	- Módulo real de elasticidade (ou de Young)
f	- Frequência
G	- Módulo de cisalhamento
\bar{G}	- Módulo complexo de cisalhamento
G_I	- Módulo imaginário de cisalhamento
G_R	- Módulo real de cisalhamento
h	- Espessura de um elemento viscoelástico
k	- Rigidez
\bar{k}	- Rigidez complexa
n	- Tamanho de amostra
N	- Tamanho populacional
m	- Massa de um sistema de um grau de liberdade
\hat{R}	- Fator de redução de escala potencial ou estatística de Gelman-Rubin
T	- Transmissibilidade / Temperatura
\bar{T}	- Transmissibilidade complexa
t	- Instante de tempo
t_0	- Instante de tempo inicial
T_0	- Temperatura de referência
T_A	- Temperatura de ativação

- V - Variância entre cadeias de Markov
- W - Variância dentro de uma cadeia de Markov
- Y - Variável aleatória

Letras Gregas

- α_T - Fator de deslocamento
- α - Nível de significância
- β - Parâmetro do material no modelo de derivadas fracionárias
- ε - Deformação
- ε_0 - Deformação instantânea
- η - Fator de perda
- η_E - Fator de perda longitudinal
- η_G - Fator de perda ao cisalhamento
- θ - Parâmetro do modelo Bayesiano
- θ_E - Argumento do módulo de elasticidade
- θ_1 - Parâmetro empírico do material na equação WLF
- θ_2 - Parâmetro empírico do material na equação WLF
- μ - Média populacional
- ν - Coeficiente de Poisson
- $\bar{\nu}$ - Coeficiente complexo de Poisson
- ρ - Densidade do material
- σ - Tensão / Desvio padrão populacional
- σ^2 - Variância populacional
- ω - Frequência angular
- ω_R - Frequência reduzida

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	17
1.1 OBJETIVO GERAL	20
1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	20
1.3 ESTRUTURA DA TESE	21
2 MATERIAIS VISCOELÁSTICOS	22
2.3 REPRESENTAÇÃO POR MÓDULOS COMPLEXOS	23
2.4 EFEITOS DE FATORES EXTERNOS	26
2.4.1 Efeito da Temperatura	27
2.4.2 Efeito da Frequência	28
2.4.3 Dependência em Frequência e Temperatura	29
2.5 CURVAS MESTRES	30
2.6 GRÁFICO WICKET (<i>WICKET PLOT</i>)	36
2.7 MODELAGEM DINÂMICA POR DERIVADAS FRACIONÁRIAS	37
2.8 USO DE MATERIAIS VISCOELÁSTICOS EM ISOLAMENTO DE VIBRAÇÕES	43
3 INFERÊNCIA BAYESIANA E MÉTODOS MCMC	56
3.1 INFERÊNCIA BAYESIANA	56
3.1.1 Distribuições a Priori	58
3.1.2 Função de Verossimilhança e Princípio da Verossimilhança	60
3.1.3 Teorema de Bayes	62
3.1.4 Intervalos de Credibilidade	64
3.1.5 <i>Bootstrap</i> Bayesiano (BB)	65
3.2 MÉTODOS DE MONTE CARLO VIA CADEIAS DE MARKOV (MCMC)	66
3.2.1 Métodos de MCMC para Inferência Bayesiana	67
3.2.1.1 Algoritmo de Metropolis-Hastings	68
3.2.1.2 Amostrador de Gibbs	69
3.2.2 Análise da Convergência do MCMC	71
3.2.2.1 Representatividade do MCMC	71
3.2.2.2 Precisão do MCMC	77
3.2.2.3 Eficiência do MCMC	78
3.3 COMPORTAMENTO MECÂNICO	79

4 MATERIAIS E MÉTODOS	85
4.1 MATERIAL VISCOELÁSTICO.....	85
4.2 EQUIPAMENTO DE AQUISIÇÃO DE DADOS	86
4.3 EXPERIMENTOS.....	88
4.4 PROGRAMAS COMPUTACIONAIS	89
4.5 MODELO BAYESIANO	90
4.5.1 Verossimilhança	90
4.5.2 Distribuições a Priori.....	91
4.5.3 Implementação	93
5 DESCRIÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	96
5.2 RESULTADOS COM EQUAÇÃO WLF	96
5.3 RESULTADOS COM EQUAÇÃO DE ARRHENIUS	108
5.4 DISCUSSÃO FINAL	117
6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	119
6.1 CONCLUSÕES	119
6.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	120
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	121
APÊNDICE A – PROGRAMA COMPUTACIONAL RELATIVO AO MODELO	
BAYESIANO COM EQUAÇÃO DE ARRHENIUS	129
APÊNDICE B – DIAGNÓSTICOS DE CONVERGÊNCIA PARA AS SIMULAÇÕES	
MCMC UTILIZANDO A EQUAÇÃO WLF	138
APÊNDICE C – DIAGNÓSTICOS DE CONVERGÊNCIA PARA AS SIMULAÇÕES	
MCMC UTILIZANDO A EQUAÇÃO DE ARRHENIUS	141

INTRODUÇÃO

Para boa parte dos sistemas mecânicos de interesse, em que os valores de amortecimento encontrados não são elevados, uma vibração é um movimento oscilatório do sistema focado em relação a uma configuração de equilíbrio, movimento esse decorrente de ações dinâmicas (isto é, esforços variáveis no tempo) aplicadas sobre esse sistema. Estas vibrações, em várias ocasiões, são vistas como indesejáveis, em vista, dentre outras, das consequências em termos de ruído, perda de energia, queda de rendimento e fadiga (TENG e HU, 2001). Isto leva à necessidade de mantê-las em níveis considerados aceitáveis, ou seja, elas devem ser controladas.

Os materiais viscoelásticos, que incluem os polímeros em geral, têm sido largamente utilizados em métodos passivos de controle de vibrações, devido à sua alta capacidade de dissipar energia (NASHIF et al, 1985). Os materiais elastoméricos, aqui utilizados, são utilizados em sistemas de controle de vibrações como em equipamentos de laboratórios e escritório, computadores e periféricos, telecomunicações e eletrônicos, equipamentos industriais e automobilísticos. São ditos materiais viscoelásticos aqueles que combinam os comportamentos viscoso e elástico (FERRY, 1980).

Os materiais elásticos se deformam imediatamente quando é aplicada uma tensão e, quando esta é retirada, retornam à sua forma e volume originais. Neste momento, a energia de deformação é também recuperada, comportamento este que está relacionado ao armazenamento de energia. Os materiais linearmente elásticos obedecem à lei de Hooke, em que a tensão é diretamente proporcional à deformação.

Já os materiais viscosos são aqueles que se deformam continuamente quando submetidos a uma tensão. Quando esta é retirada, não retornam ao seu estado original, comportamento que está relacionado à dissipação de energia. Na faixa linear, eles seguem a lei de Newton, em que a tensão é diretamente proporcional a taxa de deformação, porém independente da deformação em si.

Para a realização de projetos eficazes e eficientes de controle passivo de vibrações através de materiais viscoelásticos, é necessário que se tenha um conhecimento detalhado do comportamento dinâmico do material empregado

(ESPÍNDOLA et al, 2008). A representação por módulos complexos tem sido uma forma bem estabelecida e largamente utilizada de se descrever o comportamento dinâmico destes materiais no domínio da frequência. Este comportamento é, em especial, dependente da frequência e da temperatura (NASHIF et al, 1985; PRITZ, 1998; ESPÍNDOLA et al, 2003).

Cada módulo complexo desempenha um papel análogo ao módulo elástico correspondente da elasticidade clássica. Ele reúne, contudo, na notação complexa, não só a representação das características elásticas, mas também das características dissipativas do material. As características elásticas são descritas pelo módulo real de elasticidade, enquanto as características dissipativas são descritas ou pelo módulo imaginário de elasticidade ou pelo fator de perda correspondente. Essas propriedades, módulo real e fator de perda, são conhecidas como propriedades dinâmicas.

Para a completa caracterização dos módulos complexos de um material viscoelástico, ao longo de amplas faixas de frequência e temperatura, existem duas etapas. A primeira é experimental e visa obter dados relativos às propriedades dinâmicas, ensaiando o material através de um método específico, em diferentes valores de frequência e temperatura. A segunda é analítica e numérica, em que se faz o processamento dos dados coletados, para realizar a sua consolidação, de forma que o material seja, do ponto de vista dinâmico, satisfatoriamente descrito. Destacam-se, aqui, o nomograma de frequência reduzida (JONES, 2001) e o modelo de derivada de ordem fracionária de quatro parâmetros (PRITZ, 1996).

Enquanto os valores de módulos elásticos em metais se mantêm com uma dispersão entre 3 a 5% (BELDICA e HILTON, 1999), tem-se, para materiais viscoelásticos, que a dispersão estatística experimental associada às propriedades dinâmicas é da ordem de 20% (BALBINO, 2012). Os fatores de incerteza associados a esta dispersão, em boa parte decorrentes da fabricação desses materiais, ainda são de difícil, senão impossível controle.

De modo a considerar estas incertezas estatisticamente, pode-se considerar a caracterização de um material viscoelástico como um problema de identificação (estimação) dos parâmetros que representam as propriedades dinâmicas desses materiais. Há vários métodos estatísticos utilizados para identificação de parâmetros,

ou seja, para estimar os parâmetros de interesse, assumindo que estes, apesar de desconhecidos, são quantidades fixas.

Dentre os mais conhecidos, estão aqueles que usam o princípio da máxima verossimilhança e o de minimização dos erros quadráticos. Embora os métodos clássicos de estimação de parâmetros possam ser aplicados para se obter maior conhecimento sobre os módulos complexos de um material viscoelástico, uma alternativa que permite incorporar o grau de incerteza a respeito dos parâmetros que definem as propriedades dinâmicas é o uso da inferência bayesiana. Esta abordagem considera as quantidades como variáveis aleatórias e o interesse reside em descrevê-las através de um modelo probabilístico.

A estimação com a inferência bayesiana utiliza distribuições de probabilidade a priori, o que possibilita incorporar o conhecimento que se tem do comportamento do fenômeno, mesmo antes de se realizar o experimento e a coleta de dados. Este conhecimento a priori é combinado com a informação proveniente dos dados, devidamente mensurada pela função de verossimilhança, permitindo modelar probabilisticamente incertezas do modelo por meio de distribuições de probabilidade então chamadas de distribuições a posteriori.

O método bayesiano ao dotar os parâmetros com informação prévia, através das distribuições a priori, impõe restrições físicas leves, para forçar o problema a encontrar uma solução única e estável. Ele também fornece uma estrutura probabilística rigorosa, para dar conta da maioria das fontes de erro que contribuem para a incerteza dos parâmetros a serem inferidos.

A abordagem bayesiana trata os módulos complexos como variáveis aleatórias e também considera a incerteza de modelagem (ZHANG et al, 2013). É importante quantificar a incerteza com que as propriedades são identificadas, já que as incertezas devido a medição e erros do modelo são um componente importante da incerteza total (GOGU et al, 2010).

Trabalhos recentes, como Gogu et al (2010), Zhang et al (2013) e Hernandez et al (2015) conduzem estudos aplicando a abordagem bayesiana para estimar parâmetros materiais, estimulando a utilização de técnicas probabilísticas para a descrição das propriedades de materiais elásticos e viscoelásticos. Contudo, um estudo visando à caracterização integrada em uma ampla faixa de temperaturas e frequências, e com a necessária indicação da qualidade e da representatividade

dos resultados alcançados, ainda não foi apresentado. Esse estudo é crucial para que se possa conceber e projetar dispositivos viscoelásticos para controle de vibrações com a confiança, a precisão e a qualidade requeridas.

O presente estudo aplica um modelo bayesiano para estimar os parâmetros de propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos em uma ampla faixa de frequências e temperaturas, considerando o modelo de derivada de ordem fracionária de quatro parâmetros (PRITZ, 1996). Como a temperatura é um fator importante de variação, fator esse ainda mais marcante do que a frequência, são estimados modelos considerando a estimativa do fator de deslocamento correspondente através da equação empírica de WLF (Williams-Landel-Ferry) (WILLIAMS et al, 1955) e da equação teórica de Arrhenius (LEWIS et al, 1989).

Este trabalho apresenta uma caracterização dinâmica ampla em frequência e temperatura de um material viscoelástico e apresenta uma forma de quantificar a incerteza dos parâmetros de interesse de forma probabilística, através da utilização da inferência bayesiana, buscando também, uma forma de verificar a adequação do modelo empregado.

O objetivo geral, os objetivos específicos e a estrutura da tese serão detalhados a seguir.

1.1 OBJETIVO GERAL

Modelar probabilisticamente as propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos através da abordagem de inferência bayesiana, com vistas ao uso desses materiais no controle de vibrações mecânicas.

1.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Caracterizar as propriedades dinâmicas de um material viscoelástico, obtidas experimentalmente, de forma integrada, em frequência e temperatura, com o uso do modelo de derivada de ordem fracionária de quatro parâmetros, em associação com os modelos (equações) WLF e de Arrhenius;

- Utilizar a abordagem bayesiana para inferir sobre os parâmetros resultantes da caracterização dinâmica, encontrando as distribuições de probabilidade correspondentes;
- Quantificar a incerteza dos parâmetros associados às propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos.

1.3 ESTRUTURA DA TESE

O conteúdo deste trabalho é disposto em seis capítulos. O presente capítulo engloba a introdução e os objetivos, além de expor a estrutura geral da tese.

O capítulo 2 é dedicado aos materiais viscoelásticos, esclarecendo conceitos relativos à sua caracterização dinâmica, enfatizando os principais aspectos de interesse de um particular material e apresentando a descrição por módulos complexos de elasticidade.

Já no capítulo 3, é exposta a teoria sobre a inferência bayesiana e os métodos de simulação estocástica, conhecidos como métodos de Monte Carlo via Cadeias de Markov. Ao final desse capítulo são discutidos os trabalhos conduzidos na área de controle passivo de vibrações aplicando a abordagem bayesiana.

O capítulo 4 apresenta os materiais e métodos utilizados na condução deste trabalho. As seções correspondentes descrevem o material viscoelástico utilizado, o experimento original e as variáveis de interesse. Este capítulo detalha ainda o programa computacional empregado para a realização das análises de dados e o modelo bayesiano, bem como a determinação das distribuições a priori.

Os resultados alcançados e a discussão desses resultados são abordados no capítulo 5, em sua maior parte de forma gráfica.

Finalmente, no capítulo 6, são relacionadas as conclusões e os comentários finais, junto com as propostas para trabalhos futuros.

2 MATERIAIS VISCOELÁSTICOS

Como já antecipado, os materiais viscoelásticos são aqueles que, quando deformados, apresentam um comportamento combinado os modelos elástico e viscoso. Os materiais elásticos se deformam imediatamente quando uma tensão é aplicada, retornando à sua forma e volume originais quando esta é retirada. Este comportamento está relacionado ao armazenamento de energia, já que, nesse segundo momento, a energia de deformação também é recuperada.

Segundo Findley et al (1976), a maioria dos materiais se comporta elasticamente, ou quase, quando submetido a pequenas tensões. Um material é dito linearmente elástico quando a tensão é diretamente proporcional à deformação, sem dependência da taxa de deformação, seguindo, portanto, a lei de Hooke.

Já os materiais viscosos têm um comportamento caracterizado por se deformarem continuamente quando submetidos a uma tensão. Quando esta é retirada, não retornam ao seu estado original, estando este comportamento relacionado à dissipação de energia. Na faixa linear, conforme a lei de Newton, a tensão é diretamente proporcional à taxa de deformação, mas independente da deformação em si.

Segundo Pritz (1998), todos os materiais sólidos reais possuem, em maior ou menor grau, propriedades elásticas e de amortecimento, sendo o amortecimento entendido como a capacidade de dissipar energia mecânica durante uma deformação dinâmica de qualquer tipo. Ocorre que os materiais viscoelásticos, mesmo quando solicitados por taxas de deformações infinitesimais, apresentam claramente um comportamento que combina características elásticas e viscosas (FERRY, 1980).

Quando um elemento de material viscoelástico é submetido a uma tensão harmônica, a deformação correspondente não está em fase com a tensão, como no caso de um sólido perfeitamente elástico, e nem defasada de 90° , como no caso de um líquido completamente viscoso, mas entre estas condições. O valor do ângulo de fase depende da frequência e da temperatura (GNATOWSKI e KOSZKUL, 2006). Uma parte da energia é armazenada e recuperada em cada ciclo e outra parte é dissipada em forma de calor.

2.3 REPRESENTAÇÃO POR MÓDULOS COMPLEXOS

Para descrever a relação entre tensão e deformação de materiais homogêneos e isotrópicos em tensão pura ou cisalhamento puro, em sua região de comportamento elástico, o conhecimento dos módulos de elasticidade correspondentes (módulo de elasticidade E ou módulo de cisalhamento G) é suficiente. Essa abordagem, empregada na teoria da elasticidade clássica, pode ser estendida para o caso de materiais viscoelásticos pelo conceito de módulos complexos. A abordagem por módulos complexos tem sido uma forma bem estabelecida de se descrever as relações entre tensão e deformação para esses materiais (SNOWDON, 1968).

Os módulos de interesse podem ser explicitados num primeiro momento pela aplicação da transformada de Fourier à equação constitutiva (NASHIF et al, 1985)

$$\sigma + \left(\sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{d^n \sigma}{dt^n} \right) = b_0 \varepsilon + \left(\sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{d^n \varepsilon}{dt^n} \right) \quad (01)$$

onde σ é a tensão, ε é a deformação, t é o tempo e a_n , b_0 e b_n são constantes características do material. Nessa representação, tanto a tensão quanto a deformação são, de forma geral, funções do tempo, o que deve ser considerado como implícito acima. A equação (01) é considerada novamente na seção 2.7.

Com a aplicação da transformada de Fourier, esta representação passa a se dar no domínio da frequência, tomando a seguinte forma (NASHIF et al, 1985):

$$\frac{\sigma(\omega)}{\varepsilon(\omega)} = \frac{b_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (i\omega)^n b_n}{1 + \sum_{n=1}^{\infty} (i\omega)^n a_n} = \bar{E}(\omega) \quad (02)$$

onde ω é a frequência e \bar{E} o módulo de elasticidade. A barra, na notação \bar{E} , indica que se trata de uma grandeza complexa.

A razão apresentada na equação (02), além de ser complexa, é descrita no domínio da frequência pelo fato de que grande parte dos problemas de controle passivo de vibrações e ruídos utilizando materiais viscoelásticos é resolvida naquele domínio (SNOWDON, 1968; NASHIF et al, 1985; PRITZ, 2000). Isso será exemplificado mais adiante na seção 2.8.

Desta forma, os módulos elásticos (e reais) da elasticidade clássica podem ser substituídos pelos módulos complexos correspondentes, ao se tratar da descrição do comportamento dinâmico de materiais viscoelásticos no domínio da frequência. As quantidades complexas representam tanto as características elásticas, através de suas partes reais, quanto as características dissipativas, através das partes imaginárias (SNOWDON, 1968; NASHIF et al, 1985).

Assim, o módulo complexo de elasticidade (ou módulo complexo de Young) \bar{E} de um dado material viscoelástico pode ser escrito como

$$\bar{E} = E_R + iE_I \quad (03)$$

onde E_R é o módulo real de elasticidade e E_I é o módulo imaginário de elasticidade.

Pode-se definir o fator de perda η_E como sendo a razão entre o módulo imaginário e o módulo real, ou seja,

$$\eta_E = E_I / E_R \quad (04)$$

O fator de perda está associado a dissipação de energia do material, sendo que quanto maior a dissipação, maior o valor do fator de perda.

Desta forma, escreve-se o módulo complexo de elasticidade como sendo

$$\bar{E} = E_R (1 + i\eta_E) \quad (05)$$

De forma análoga, pode-se escrever o módulo complexo de cisalhamento \bar{G} como sendo

$$\bar{G} = G_R + iG_I \quad (06)$$

ou

$$\bar{G} = G_R (1 + i\eta_G) \quad (07)$$

onde G_R é o módulo real de cisalhamento, G_I é o módulo imaginário de cisalhamento e

$$\eta_G = G_I / G_R \quad (08)$$

é o fator de perda ao cisalhamento.

As propriedades dinâmicas de um material viscoelástico são os módulos reais e os fatores de perda correspondentes.

Por ser uma grandeza complexa, composta de uma parte real e uma parte imaginária, pode-se escrever o módulo complexo de elasticidade descrito na equação (08) em termos do seu módulo e argumento. Assim como

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \quad (09)$$

Tem-se

$$\bar{E} = E e^{i\theta_E} \quad (10)$$

onde E é o módulo de \bar{E} e θ_E o seu argumento, dados respectivamente por

$$E = \sqrt{E_R^2 + E_I^2} \quad (11)$$

e

$$\theta_E = \arctg\left(\frac{E_I}{E_R}\right) \quad (12)$$

Para verificar as relações acima considera-se o módulo complexo de elasticidade a partir das equações (09) e (10), por

$$\bar{E} = E \cos \theta_E + i E \sin \theta_E \quad (13)$$

A parte real e a parte imaginária do módulo complexo de elasticidade são dadas, respectivamente, por

$$E_R = E \cos \theta_E \text{ e } E_I = E \sin \theta_E \quad (14 \text{ a,b})$$

Desta forma,

$$(E_R^2 + E_I^2)^{1/2} = [E^2 (\cos^2 \theta_E + \sin^2 \theta_E)]^{1/2} = E \text{ e } E_I/E_R = \sin \theta_E / \cos \theta_E = \tg \theta_E \quad (15 \text{ a,b})$$

O que comprova as relações (16) e (17)

2.4 EFEITOS DE FATORES EXTERNOS

Os materiais viscoelásticos estão sujeitos a ações de fatores externos que podem modificar o seu comportamento dinâmico. Assim, ao se implementar ações eficazes de controle de vibração e ruído, faz-se necessária a compreensão desses efeitos. A variação das propriedades do material com os fatores externos pode se tornar uma vantagem ao utilizá-los, dado que permite uma flexibilidade no projeto de controle.

Segundo Nashif et al (1985), os principais fatores que alteram o comportamento de um material viscoelástico são a temperatura, a frequência, a pré-carga estática e a amplitude de carga dinâmica. Em casos mais específicos, ou extremos, há que se considerar também o envelhecimento, a exposição a substâncias corrosivas, como óleo, álcool e a exposição à radiação, dentre outros.

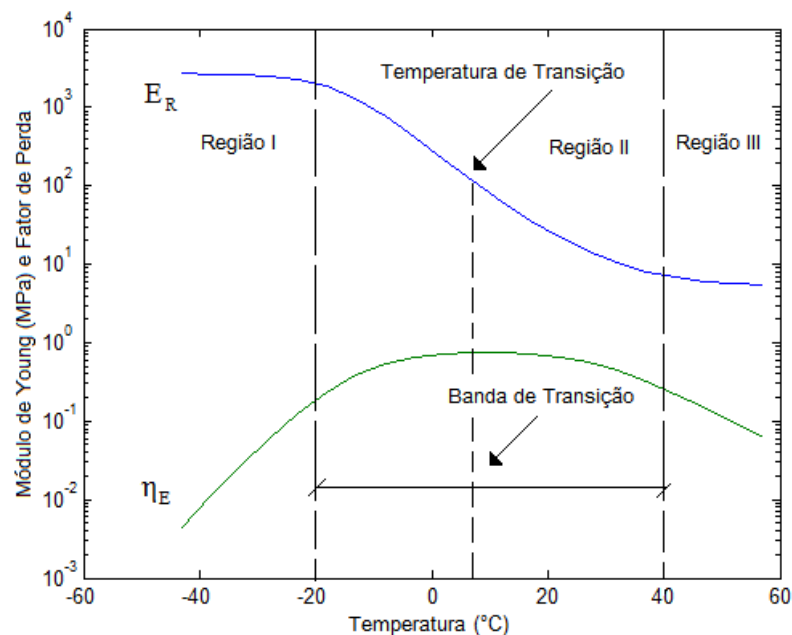
Os efeitos da temperatura e da frequência são, via de regra, na faixa linear, os mais importantes (JONES, 2001).

2.4.1 Efeito da Temperatura

Segundo Nashif et al (1985), a temperatura é um dos fatores externos mais importantes a afetar as propriedades dinâmicas dos materiais viscoelásticos. Pode-se argumentar, até, que se trata do mais marcante (JONES, 2001).

Três regiões de maior interesse, no que diz respeito à influência da temperatura, como ilustrado na figura 1, a frequência de referência utilizada foi de 20 Hz.

FIGURA 1 – VARIAÇÃO TÍPICA DO MÓDULO REAL E DO FATOR DE PERDA COM A TEMPERATURA EM UM MATERIAL VISCOELÁSTICO TÍPICO.



FONTE: O Autor

A primeira região é denominada região vítrea. Esta região é onde o material atinge o valor máximo do módulo real de elasticidade, enquanto possui valores muito baixos de fator de perda. Conforme a temperatura aumenta nesta região, o módulo real decai lentamente enquanto o fator de perda aumenta significativamente.

A segunda região conhecida como região de transição. Nela, à medida que a temperatura aumenta, o módulo real de elasticidade decresce rapidamente, sendo que o fator de perda assume, aí, o seu valor máximo, na chamada temperatura de transição.

Por fim, há a terceira região, denominada de região elástica. Ela se caracteriza pelo fato de tanto o módulo real quanto o fator de perda variarem lentamente conforme o aumento da temperatura e assumirem valores relativamente baixos.

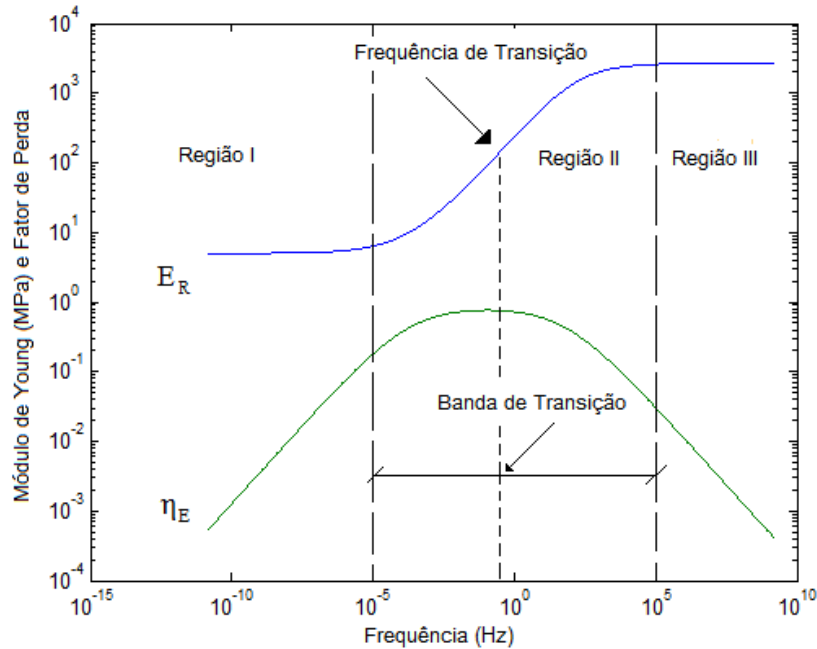
O exposto acima para o módulo real de elasticidade e o correspondente fator de perda também vale para as propriedades ao cisalhamento.

2.4.2 Efeito da Frequência

De forma geral, o módulo real sempre aumenta com o aumento da frequência, mesmo que este aumento seja pequeno. Já o fator de perda inicialmente aumenta com o aumento da frequência, atinge um valor máximo e depois decresce, com o prosseguimento da elevação da frequência. O valor máximo do fator de perda ocorre na frequência conhecida como frequência de transição.

O comportamento em frequência é, dessa forma, qualitativamente inverso ao comportamento em temperatura, ainda que sejam necessárias várias décadas em frequência para refletir uma mesma mudança oposta de comportamento, provocada por alguns graus em temperatura, daí o caráter mais marcante desta. A figura 2 ilustra o comportamento dinâmico do material ao longo da frequência considerando uma temperatura de referência de 0°C, sendo apresentadas as regiões I, II e III, correspondendo, pela ordem, às regiões denominadas vítrea, de transição e elástica.

FIGURA 2 – VARIAÇÃO TÍPICA DO MÓDULO REAL E DO FATOR DE PERDA COM A FREQUÊNCIA EM UM MATERIAL VISCOELÁSTICO TÍPICO.



Fonte: O Autor

A relação inversa anteriormente apontada fornece a base para o princípio da superposição frequência-temperatura de materiais viscoelásticos (FERRY, 1980; NASHIF et al, 1985), a ser abordado mais adiante.

2.4.3 Dependência em Frequência e Temperatura

Devido à dependência das propriedades dinâmicas dos materiais viscoelásticos em frequência e temperatura, denotam-se os módulos complexos como funções destas variáveis. Desta forma, o módulo complexo de elasticidade \bar{E} é denotado por

$$\bar{E}(\omega, T) = E_R(\omega, T)[1 + i\eta_E(\omega, T)] \quad (16)$$

onde ω é a frequência, em rad/s, e T é a temperatura.

Já o módulo complexo de cisalhamento \bar{G} é denotado por

$$\bar{G}(\omega, T) = G_R(\omega, T)[1 + i\eta_G(\omega, T)] \quad (17)$$

Face à analogia com a teoria clássica da elasticidade, tem-se que o módulo complexo de cisalhamento se relaciona com o módulo complexo de elasticidade e com o coeficiente de Poisson da seguinte forma (LAKES, 1999)

$$\bar{\nu}(\omega, T) = \frac{\bar{E}(\omega, T)}{2\bar{G}(\omega, T)} - 1 \quad (18)$$

onde \bar{G} é o módulo complexo de cisalhamento, \bar{E} é o módulo complexo de elasticidade e $\bar{\nu}$ é o coeficiente complexo de Poisson.

Para materiais viscoelásticos típicos, tais como elastômeros, o coeficiente de Poisson é, usualmente, assumido como sendo real e aproximadamente igual a 0,5. Sendo assim, decorre, que (GENT, 2001)

$$E_R(\omega, T) \approx 3G_R(\omega, T) \quad (19)$$

$$\eta_E(\omega, T) \approx \eta_G(\omega, T) \quad (20)$$

Segundo Tschoegl et al (2002), ao se assumir este coeficiente de Poisson, considera-se que o módulo volumétrico é infinito, o que nunca poderia ser atingido na prática. Em linha com essa argumentação, já estudos que se mostram contrários ao uso dessa hipótese (PRITZ, 1998; PRITZ, 2007; MOTT et al, 2008).

2.5 CURVAS MESTRES

Para uma ampla caracterização dinâmica de materiais viscoelásticos é necessário conhecer o seu comportamento dinâmico em largas faixas de frequência e temperatura. Após realizar ensaios experimentais com o material de interesse em várias temperaturas, sendo que, para cada uma delas, uma ampla faixa de frequências é contemplada, é obtido um conjunto de curvas experimentais,

associadas às temperaturas de ensaio. Estas curvas podem ser superpostas utilizando o princípio da superposição frequência-temperatura, de modo a obter uma caracterização completa.

Esse princípio considera que, para determinados materiais viscoelásticos, as dependências em frequência e temperatura podem ser relacionadas, permitindo que se estabeleça a dependência em uma única variável composta, que combina os efeitos da frequência e da temperatura (FERRY et al, 1952; JONES, 1990). Sendo assim, as curvas obtidas experimentalmente, mostradas de forma típica na figura 5, podem ser superpostas em uma única temperatura de referência T_0 , por meio de deslocamentos em frequência apropriados, um para cada temperatura. Desse modo, são formadas curvas mestres, uma para cada propriedade dinâmica.

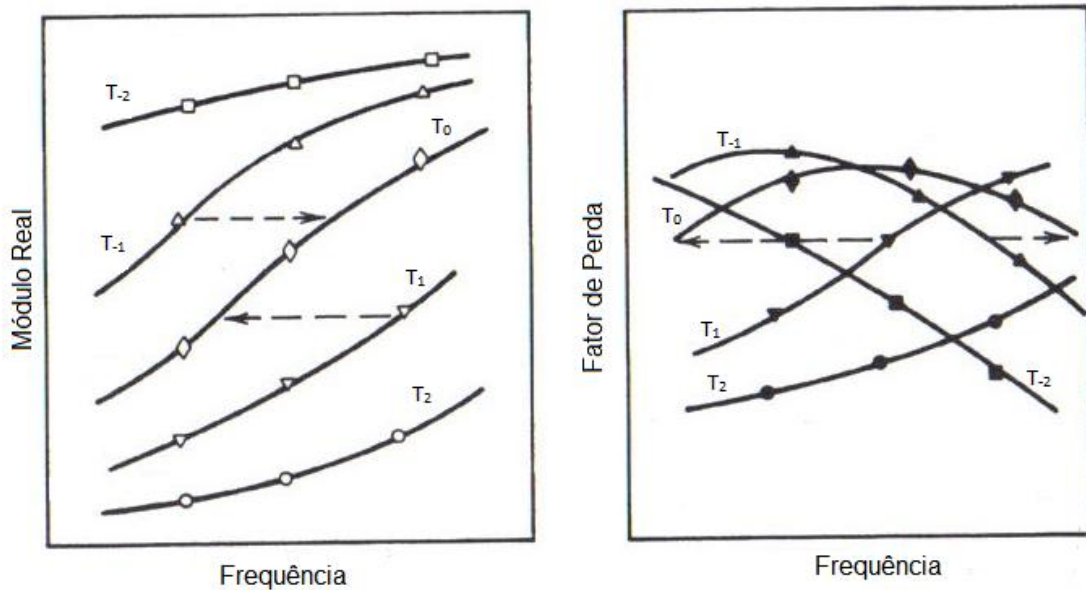
Os materiais viscoelásticos que seguem o princípio da superposição frequência-temperatura são conhecidos como termoreologicamente simples e são referenciados nesse texto como típicos. Para as propriedades dinâmicas destes materiais, valem as seguintes expressões (FERRY, 1980):

$$E_{R0}(\omega_R) = \left(\frac{T_0 \rho_0}{T \rho} \right) E_R(\omega, T) \quad (21)$$

$$(\eta_E)_0(\omega_R) = \eta_E(\omega, T) \quad (22)$$

onde E_{R0} é o módulo real de elasticidade na temperatura de referência T_0 , $(\eta_E)_0$ é fator de perda em T_0 , T é temperatura, ω é frequência, ρ é a densidade, ρ_0 é a densidade em T_0 e ω_R é a variável composta antes mencionada, conhecida como frequência reduzida. A frequência reduzida ω_R é igual a $\alpha_T(T)\omega$, sendo α_T o fator de deslocamento, cujos valores são $0 < \alpha_T < 1$ para $T > T_0$, $\alpha_T = 1$ para $T = T_0$ e $\alpha_T > 1$ para $T < T_0$.

FIGURA 3 – CURVAS EXPERIMENTAIS DE PROPRIEDADES DINÂMICAS DE MATERIAIS VISCOELÁSTICOS EM FREQUÊNCIA E TEMPERATURA.

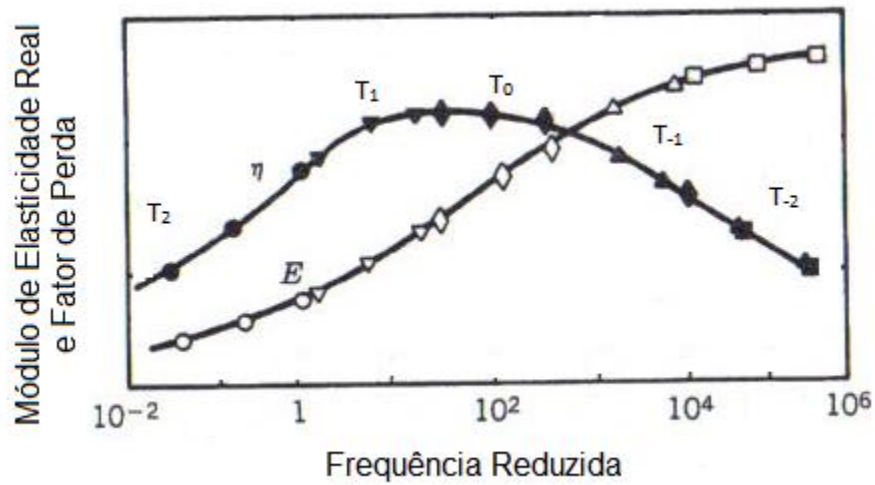


FONTE: Nashif et al, 1985

As expressões (21) e (22) indicam que, exceto por um fator igual a $(T_0\rho_0/T\rho)$ para o módulo real (fator esse, via de regra, próximo de 1), as propriedades dinâmicas dadas numa determinada frequência ω e numa determinada temperatura T são iguais às propriedades dinâmicas dadas numa frequência composta ω_R , à temperatura de referência T_0 . O afirmado anteriormente também vale para o módulo real de cisalhamento e o fator de perda correspondente.

Cada fator de deslocamento $\alpha_T(T)$ produz uma variação em frequência equivalente à alteração em temperatura de T para T_0 (vide figura 3). Assim, a frequência e a temperatura iniciais dão lugar à variável composta ω_R , que é a frequência reduzida. Essa variável que combina os efeitos da temperatura e da frequência.

O diagrama de frequência reduzida, resultante da superposição das curvas, é exposto na figura 4.

FIGURA 4 – DIAGRAMA DE FREQUÊNCIA REDUZIDA.

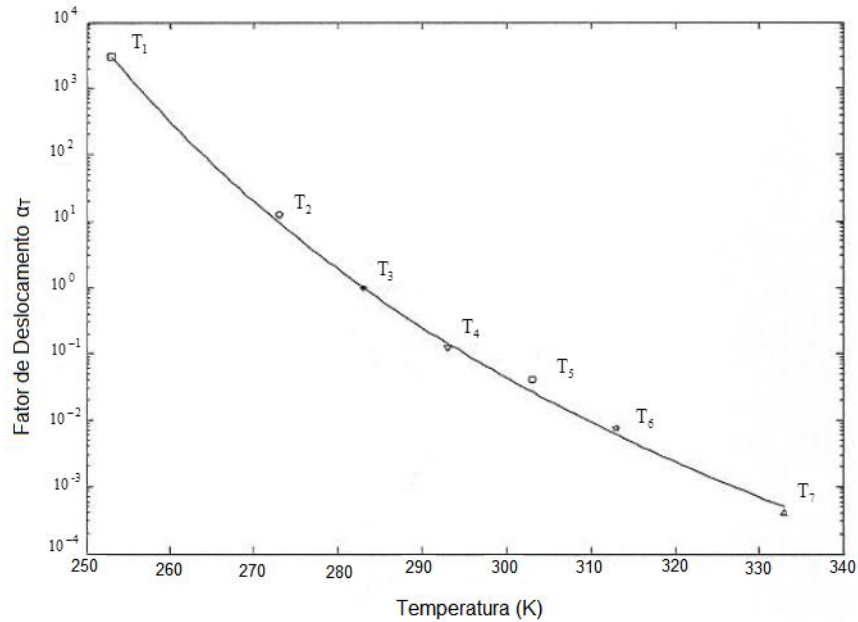
FONTE: Nashif et al, 1985.

A determinação do fator de deslocamento α_T é de importância decisiva para o processo de redução (consolidação) de curvas. Para modelá-lo, existem duas equações já consagradas pela literatura. Essas equações são expostas a seguir.

Após estudos realizados com vários materiais, estabeleceu-se uma equação de α_T versus $T - T_0$, que é utilizada para se representar o fator de deslocamento. Essa equação, de caráter empírico, é conhecida como equação Williams-Landel-Ferry (WLF) e dada por (WILLIAMS et al, 1955)

$$\log_{10} \alpha_T(T) = \frac{-\theta_1(T - T_0)}{\theta_2 + T - T_0} \quad (23)$$

onde θ_1 e θ_2 são parâmetros a serem determinados para cada material. Um gráfico típico de fator de deslocamento utilizando a equação WLF é apresentado na figura 5.

FIGURA 5 – FATOR DE DESLOCAMENTO VERSUS TEMPERATURA.

FONTE: Lopes et al, 2004

O fator de deslocamento também tem sido determinado através da equação teórica de Arrhenius (LEWIS et al, 1989; JONES, 1990), dada por

$$\log_{10} \alpha_T(T) = T_A \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \quad (24)$$

onde $T_A = Q/2,303R$ é a chamada temperatura de ativação, sendo que R representa a constante universal dos gases e Q é a energia de ativação. Esse parâmetro também é determinado para cada material.

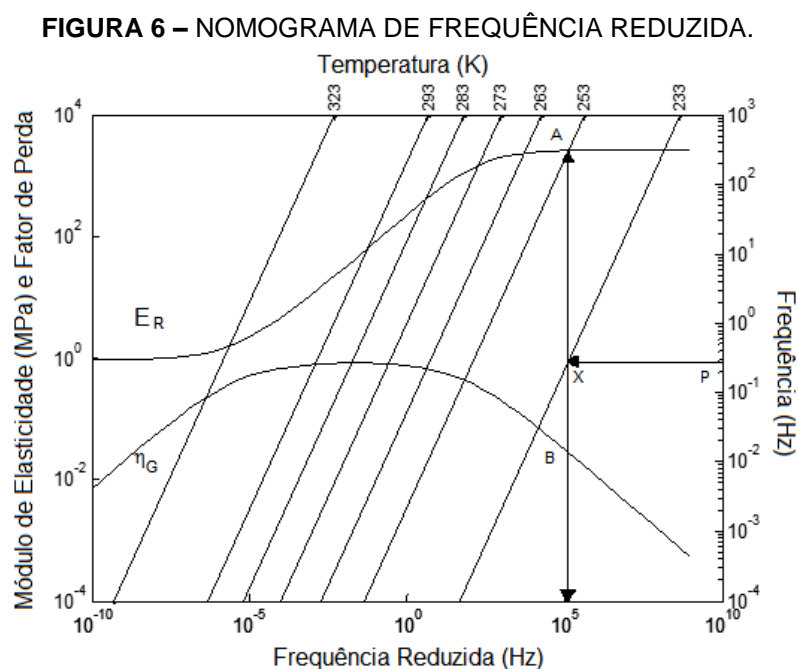
Segundo Jones (2001) na maior parte dos casos práticos, a diferença entre o melhor ajuste da equação WLF e o correspondente pela equação de Arrhenius é pequena. A conveniência de poder escolher a temperatura de referência T_0 arbitrariamente, sem mudar o parâmetro T_A , é uma característica importante da relação de Arrhenius. Segundo Mead (1999), em muitos casos, a relação de Arrhenius é a mais simples de se usar por empregar somente um parâmetro.

Salienta-se que, em ambas as equações, a temperatura é dada em K (Kelvin). O presente trabalho emprega tanto a equação WLF quanto a de Arrhenius.

As curvas de propriedades dinâmicas consolidadas podem ser apresentadas de forma mais específica, em um gráfico conhecido como nomograma de frequência reduzida (JONES, 1978; NASHIF et al, 1985; JONES, 2001). O nomograma de frequência reduzida é um aperfeiçoamento do diagrama de frequência reduzida com a inserção de escalas complementares para frequência e temperatura.

Nesse nomograma, ilustrado na figura 8, é possível obter o módulo real de elasticidade e o fator de perda na escala vertical à esquerda, como no diagrama. Contudo, na escala vertical à direita, adicional, é possível ler diretamente a frequência, enquanto a temperatura é lida, também de forma direta, na escala horizontal superior, igualmente adicional. Na escala horizontal inferior encontra-se a variável composta frequência reduzida, tal como no diagrama.

Para se obter, no nomograma, o módulo real de elasticidade e o fator de perda correspondente, é necessário traçar uma linha horizontal a partir da frequência de interesse, até cruzar com a linha inclinada da temperatura desejada. A partir desse ponto de interseção, é traçada uma linha vertical que intercepta as curvas do módulo real e do fator de perda, cujos valores podem ser lidos na escala à esquerda do nomograma. Esse procedimento é ilustrado na figura 6.



FONTE: O Autor

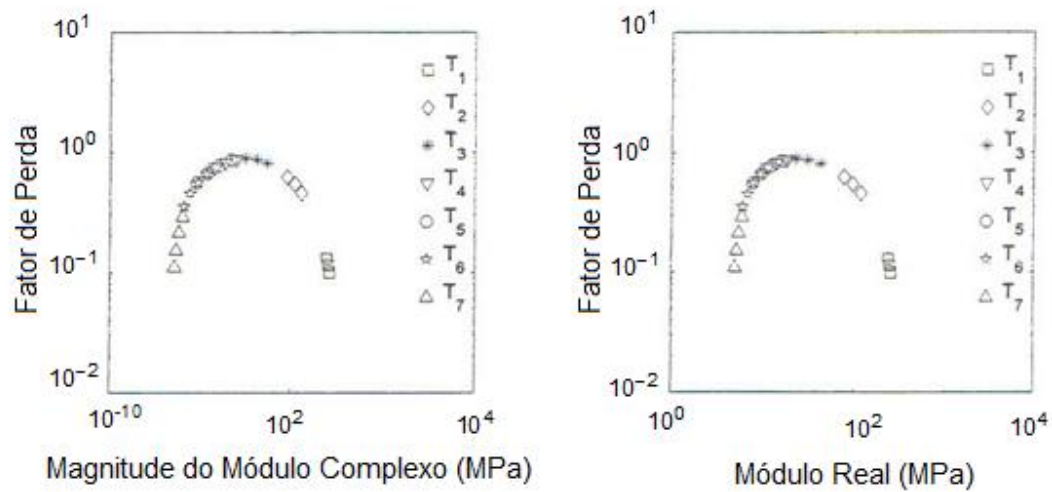
O nomograma representa de forma bastante favorável as propriedades dinâmicas de um material viscoelástico, ao longo de amplas faixas de frequência e temperatura. Isso facilita sobremaneira a representação pelos módulos complexos para uso em projetos de controle de vibração e ruído.

2.6 GRÁFICO WICKET (*WICKET PLOT*)

Os ensaios experimentais com materiais viscoelásticos estão sujeitos a erros e, portanto, existe a necessidade de utilizar uma metodologia que ajude a identificar se os dados coletados são consistentes, ou se existe algo que possa desqualificar os mesmos, antes da consolidação das curvas obtidas. Além disso, apesar da maioria dos materiais viscoelásticos de interesse obedecer ao princípio da superposição frequência-temperatura, ao menos de forma aproximada, existe a possibilidade de o material não obedecer a este princípio, inviabilizando o processo de redução.

Uma forma simples e largamente utilizada de se realizar essa verificação dos dados experimentais, junto com a verificação da adequação do material ao princípio da superposição, é através do *Wicket plot* (JONES, 2001). Este é um gráfico confeccionado em escala logarítmica entre o fator de perda e a magnitude do módulo complexo, ou ainda entre o fator de perda e o módulo real. Os dois formatos podem ser vistos na figura 7. O uso de escala logarítmica acomoda a ampla gama de valores dos módulos de elasticidade exibida pela maioria dos materiais viscoelásticos. Com esta escala, é possível mostrar as várias ordens de grandeza necessárias em ensaios de caracterização dinâmica dos materiais poliméricos (JONES, 2001).

FIGURA 7 – WICKET PLOT (A) FORMA PADRÃO (B) FORMA USUAL.



FONTE: Lopes, 1998

Para considerar os resultados como sendo oriundos de um material termoreologicamente simples, os pontos experimentais lançados no gráfico Wicket devem descrever uma curva única e contínua, em forma de U invertido, sem referência à frequência e à temperatura em que cada ponto foi obtido. Isto se deve ao fato de que, para esses materiais, o fator de perda e o módulo real são descritos por curvas características em relação à frequência e à temperatura e, portanto, também são relacionados entre si por uma curva característica. Portanto, deve-se verificar se os pontos obtidos não se afastam significativamente desta curva. Os pontos muito afastados podem ser considerados contaminados, seja por erros aleatórios, seja por erros sistemáticos (JONES, 2001).

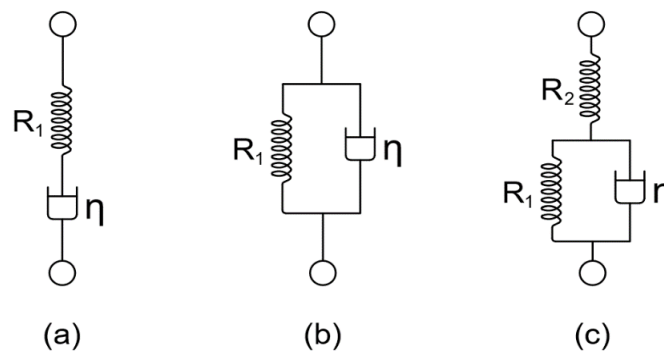
2.7 MODELAGEM DINÂMICA POR DERIVADAS FRACIONÁRIAS

O comportamento viscoelástico linear se verifica se a deformação e a taxa de deformação nos materiais viscoelásticos forem infinitesimais e se a relação tensão-deformação (expressa por uma equação constitutiva reológica) puder ser descrita por equações diferenciais lineares. A equação (01), apresentada na seção 2.3, é uma das representações lineares mais conhecidas entre tensão e deformação para materiais viscoelásticos no domínio do tempo. Por conveniência, essa equação é reproduzida abaixo.

$$\sigma + \left(\sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{d^n \sigma}{dt^n} \right) = b_0 \varepsilon + \left(\sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{d^n \varepsilon}{dt^n} \right) \quad (25)$$

Teoricamente, são necessárias derivadas de todas as ordens para se descrever materiais reais pela equação acima. Porém, em muitos casos, um número finito de termos já fornece uma primeira aproximação satisfatória. À representação entre tensão e deformação em questão podem ser associados modelos mecânicos equivalentes, constituídos por molas e amortecedores (SNOWDON, 1968). As molas estão associadas ao comportamento elástico e os amortecedores à resposta viscosa (GENT, 2001). Os modelos mais usuais são os modelos de Kelvin-Voigt, Maxwell e Zener (PRITZ, 1996), representados na figura 8.

FIGURA 8 – MODELOS COM MOLAS E AMORTECEDORES. (a) MAXWELL (b) KEVIN-VOIGT (c) ZENER.



FONTE: O Autor

Ocorre que, segundo Pritz (1996), os modelos com molas e amortecedores possuem limitações para descrever, com exatidão, o comportamento dinâmico de materiais viscoelásticos reais. Isso pode ser visualizado, por exemplo, na variação em frequência das propriedades dinâmicas, em que a inclinação das curvas experimentais é sempre menor do que a das curvas previstas por esses modelos. A razão para esse comportamento inexato pode ser ligada ao fato de que a relação tensão-deformação correspondente, definida no domínio do tempo, é expressa por uma equação diferencial linear de ordem inteira.

No entanto, essa relação pode ser modificada, substituindo as derivadas de ordem inteira na equação por derivadas de ordem fracionária. Deste modo, os modelos podem ser generalizados, resultando em curvas em frequência com inclinações menores do que as das curvas de frequência relativas aos modelos originais. Os modelos assim desenvolvidos são chamados de modelos de derivadas fracionárias ou generalizadas. A equação constitutiva que emprega o modelo de derivadas fracionárias está relacionada com a teoria molecular do comportamento dos materiais viscoelásticos (BAGLEY e TORVIK, 1986).

Os modelos de derivadas fracionárias têm demonstrado ser uma poderosa ferramenta para se descrever o comportamento dinâmico de vários materiais reais, especialmente polímeros utilizados em controle de vibrações e ruído (BAGLEY e TORVIK, 1986; PRITZ, 1996). Além desses modelos descreverem adequadamente o comportamento dinâmico dos materiais viscoelásticos, eles são simples o suficiente para os cálculos de engenharia (PRITZ, 1996).

Segundo Bagley e Torvik (1986), o modelo generalizado de ordem fracionária, que fornece uma equação constitutiva unidimensional para materiais viscoelásticos, é dado por

$$\sigma(t) + \sum_{m=1}^M b_m D^{\beta_m} [\sigma(t)] = E_0 \varepsilon(t) + \sum_{n=1}^N E_n D^{\alpha_n} [\varepsilon(t)] \quad (26)$$

onde b_m , β_m , E_0 , E_n , e α_n são parâmetros reais do modelo no domínio do tempo, $\sigma(t)$ e $\varepsilon(t)$ são os históricos de tensão e deformação, e D^{α_n} e D^{β_m} são os operadores de derivadas de ordem fracionária, sendo que m varia de 1 a M e n varia de 1 a N . A equação (26) corresponde à equação (25), porém com o emprego do cálculo fracionário.

Caso se faça, na equação (26), $m = n = 1$, $\beta_1 = \alpha_1 = \beta$ e $b_1 = b$, pode-se obter o módulo complexo de elasticidade de um material viscoelástico no domínio da frequência, com quatro parâmetros. Para tanto, aplica-se a transformada de Fourier à equação (31) (BAGLEY e TORVIK, 1986), com as restrições anteriormente expostas, de modo que

$$\bar{E}(\omega) = \frac{\bar{\sigma}(\omega)}{\bar{\varepsilon}(\omega)} = \frac{E_L + E_H b(i\omega)^\beta}{1 + b(i\omega)^\beta} \quad (27)$$

onde $E_L (=E_0)$ é dito módulo elástico, $E_H (=E_1/b)$ é dito módulo vítreo, b é um parâmetro real e β é a ordem da derivada fracionária associada, sendo que $0 < \beta < 1$

A expressão para o módulo complexo de elasticidade pode ser ampliada considerando, além de sua dependência em frequência, a sua dependência em temperatura, já que o material viscoelástico apresenta um comportamento dependente destes fatores. Para tal, a equação (27) é reescrita inserindo o fator de deslocamento $\alpha_T(T)$, apresentado na seção 2.5. Desta forma, com a inclusão do efeito da temperatura, tem-se

$$\bar{E}(\omega, T) = \frac{E_L + E_H b[i\alpha_T(T)\omega]^\beta}{1 + b[i\alpha_T(T)\omega]^\beta} \quad (28)$$

A expressão (28) considera tanto a variação em frequência quanto a variação em temperatura e, conforme a equação selecionada para descrever o fator de deslocamento possui cinco ou seis parâmetros. Caso seja selecionada a equação WLF, qual seja, a equação (23), os parâmetros do modelo são dados por $E_L, E_H, b, \beta, \theta_1$ e θ_2 , sendo θ_1 e θ_2 os parâmetros advindos da equação WLF. Caso seja selecionada a equação de Arrhenius, qual seja, a equação (24), tem-se como parâmetros E_L, E_H, b, β e T_A , sendo que T_A advém da equação de Arrhenius.

Ao considerar-se a equação (28) apenas com quatro parâmetros, a saber, E_L, E_H, b e β , ou seja, uma situação de temperatura constante, em que há somente variação em frequência, é possível ter-se uma noção qualitativa e quantitativa do sentido desses parâmetros. Isso se dá pela análise das funções que definem o módulo real e o fator de perda do material viscoelástico. Este conhecimento será importante no momento de se inserir os parâmetros em um modelo probabilístico.

Para tanto, tome-se a equação (27), que representa o módulo complexo de elasticidade, na temperatura de referência T_0 (em que $\alpha_T = 1$), pode ser dividida em suas partes real e imaginária (LOPES, 1998), gerando as seguintes equações:

$$E_R(\omega) = \frac{E_H(b\omega^\beta)^2 + (E_H + E_L)\cos(\beta\pi/2)b\omega^\beta + E_L}{(b\omega^\beta)^2 + 2\cos(\beta\pi/2)b\omega^\beta + 1} \quad (29)$$

$$E_I(\omega) = \frac{(E_H - E_L)\sin(\beta\pi/2)b\omega^\beta}{(b\omega^\beta)^2 + 2\cos(\beta\pi/2)b\omega^\beta + 1} \quad (30)$$

Desta forma, o fator de perda é dado por

$$\eta_G(\omega) = \frac{E_I(\omega)}{E_R(\omega)} = \frac{(E_H - E_L)\sin(\beta\pi/2)b\omega^\beta}{E_H(b\omega^\beta)^2 + (E_H + E_L)\cos(\beta\pi/2)b\omega^\beta + E_L} \quad (31)$$

Como descrito por Bagley e Torvik (1986), o modelo viscoelástico deve prever trabalho interno e energia de dissipação não negativos. Para isto, existem restrições termodinâmicas que devem ser atendidas. Essas restrições conduzem a $E_H > E_L > 0$ e $b > 0$, assumindo que $0 < \beta < 1$.

Adicionalmente, verifica-se que o módulo real, na equação (29), se aproxima do módulo elástico para valores baixos de frequência, enquanto que, para valores altos, se aproxima do módulo vítreo (LOPES, 1998; MEDEIROS JÚNIOR, 2011). Isto significa que

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} E_R = E_L \quad (32)$$

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} E_R = E_H \quad (33)$$

Para valores usuais dos parâmetros E_L, E_H, b e β , é observado ainda que, na região de transição, $E_R(\omega) \propto \omega^\beta$ e $E_I(\omega) \propto \omega^\beta$ (LOPES, 1998). Entende-se por valores usuais os valores encontrados na maioria dos materiais de interesse, em particular os elastômeros.

Derivando a equação (31) e igualando-se a zero, obtém-se o valor máximo do fator de perda. Mostra-se que a frequência em que esse valor ocorre, chamada frequência de transição (vide figura 2) e designada por ω_t , é tal que (LOPES, 1998)

$$\omega_t^\beta = \frac{1}{b} \sqrt{\frac{E_L}{E_H}} \quad (34)$$

Levando a equação (34) na equação (31), encontra-se o fator de perda máximo, dado por

$$(\eta_E)_{\max} = \frac{\left(1 - \frac{E_L}{E_H}\right)}{1 + \frac{E_L}{E_H} + \frac{2\sqrt{E_L/E_H}}{\cos(\beta\pi/2)}} \tan(\beta\pi/2) \quad (35)$$

Para valores usuais de E_L , E_H e β tem-se que

$$(\eta_E)_{\max} \cong \tan\left(\frac{\beta\pi}{2}\right) \quad (36)$$

de forma que

$$\beta = (2/\pi) \arctan((\eta_G)_{\max}) \quad (37)$$

A partir da equação (34), pode-se também extrair o parâmetro b , sendo

$$b = \frac{1}{(\omega_t)^\beta} \sqrt{\frac{E_L}{E_H}} \quad (38)$$

Segundo Medeiros Júnior (2011), com base nas considerações acima, é possível, em um processo de ajuste por mínimos quadrados da equação (27) a dados experimentais, buscar os parâmetros E_L , E_H , b e β em uma região que vai de

uma ordem de grandeza abaixo a uma ordem de grandeza acima dos valores fornecidos pelas equações (32), (33), (37) e (38). Tais valores podem, inclusive, ser usados como estimativas iniciais para os parâmetros em questão.

A dependência em temperatura é agregada, como já exposto, pela consideração da equação (28). Essa equação inclui também os parâmetros θ_1 e θ_2 , ou o parâmetro T_A , que são inicialmente estimados, via de regra, com base na experiência (FERRY, 1980; MEDEIROS JÚNIOR 2011).

Toda a exposição feita nessa seção para o módulo complexo de elasticidade \bar{E} também se aplica, de forma correspondente, para o módulo complexo de cisalhamento \bar{G} .

2.8 USO DE MATERIAIS VISCOELÁSTICOS EM ISOLAMENTO DE VIBRAÇÕES

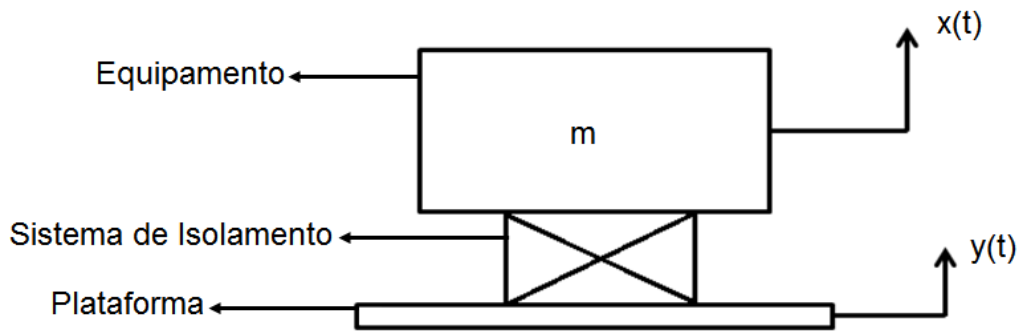
Conforme exposto nas seções anteriores, sabe-se que as propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos são dependentes, em maior ou menor grau, da frequência e da temperatura, dentre outros fatores. As implicações desse fato para projetos de controle de vibrações são ilustrados a seguir, através de um caso de isolamento passivo de vibração, elaborado com base em um exemplo originalmente abordado em Gent (2001).

Um equipamento eletrônico sensível, de 5,5 kg, está para ser montado numa plataforma, que se encontra num ambiente de temperatura variável. Essa plataforma está sujeita, de forma predominante, a uma vibração harmônica vertical, de amplitude igual a 0,4 mm e frequência igual a 50 Hz. O objetivo é projetar um sistema de isolamento que forneça 80% de redução na vibração transmitida, atentando para que a deflexão estática associada não seja excessiva, em vista do espaço disponível. Os isoladores, que são os componentes principais de um sistema de isolamento, serão viscoelásticos, face a sua eficácia.

Trata-se, portanto, de um caso de isolamento passivo de movimento (MEAD, 1999) com um grau de liberdade, ilustrado, de forma típica, na figura 9, em que $y(t)$ é a vibração da plataforma e $x(t)$ a vibração do equipamento, que é a vibração transmitida. O sistema de isolamento deve fazer com que a amplitude de

vibração de $x(t)$ seja, pelo menos, 80% menor do que a amplitude de vibração de $y(t)$, a partir da frequência de 50 Hz.

FIGURA 9 – MODELO DE ISOLAMENTO PASSIVO DE SISTEMA COM UM GRAU DE LIBERDADE.



FONTE: O Autor.

Pela 2ª lei de Newton, tem-se, para esse sistema, que

$$f_s(t) = m\ddot{x}(t) \quad (39)$$

onde $f_s(t)$ é a força exercida pelo sistema de isolamento sobre o equipamento, m é a massa do equipamento e $\ddot{x}(t)$ é a aceleração vertical do equipamento.

Aplicando a transformada de Fourier à equação (39), obtém-se

$$\bar{F}_s(\omega) = -m\omega^2 \bar{X}(\omega) \quad (40)$$

onde $\bar{F}_s(\omega)$ é a transformada de Fourier de $f_s(t)$, $\bar{X}(\omega)$ é a transformada de Fourier do deslocamento vertical $x(t)$ do equipamento e ω é a frequência.

A força $\bar{F}_s(\omega)$ pode ser inicialmente modelada de forma tal que

$$\bar{F}_s(\omega) = -k[\bar{X}(\omega) - \bar{Y}(\omega)] \quad (41)$$

onde \bar{k} é a rigidez complexa equivalente do sistema de isolamento e $\bar{Y}(\omega)$ é a transformada de Fourier do deslocamento vertical $y(t)$ da plataforma.

Levando (41) em (40), tem-se sucessivamente que

$$-\bar{k}[\bar{X}(\omega) - \bar{Y}(\omega)] = -m\omega^2 \bar{X}(\omega)$$

$$-\bar{k}\bar{X}(\omega) + \bar{k}\bar{Y}(\omega) = -m\omega^2 \bar{X}(\omega)$$

$$(\bar{k} - m\omega^2)\bar{X}(\omega) = \bar{k}\bar{Y}(\omega) \quad (42)$$

Assim sendo,

$$\bar{T}_1(\omega) = \frac{\bar{X}(\omega)}{\bar{Y}(\omega)} = \frac{\bar{k}}{\bar{k} - m\omega^2} \quad (43)$$

onde $\bar{T}_1(\omega)$ é uma função complexa da frequência denominada transmissibilidade.

A rigidez \bar{k} é, num primeiro instante, modelada por,

$$\bar{k} = k(1 + i\eta) \quad (44)$$

onde k é a rigidez equivalente do sistema de isolamento, e η é o fator de perda dos isoladores viscoelásticos. Tanto a rigidez k quanto o fator de perda η dos isoladores dependem das propriedades dinâmicas do material viscoelástico que os compõem. Portanto, rigidez k e fator de perda η também são dependentes da frequência e da temperatura. Contudo, não são consideradas, ainda, as dependências em frequência e temperatura.

Substituindo (44) em (43), tem-se que

$$\bar{T}_1(\omega) = \frac{k(1 + i\eta)}{k(1 + i\eta) - m\omega^2} = \frac{k(1 + i\eta)}{k \left[(1 + i\eta) - \frac{m\omega^2}{k} \right]} = \frac{(1 + i\eta)}{\left[\left(1 - \frac{m\omega^2}{k} \right) + i\eta \right]} \quad (45)$$

Seja então ω_1 uma frequência característica tal que

$$\omega_1^2 = \frac{k}{m} \quad (46)$$

Levando (46) em (45), chega-se a

$$\bar{T}_1(\omega) = \frac{1 + i\eta}{\left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_1^2}\right) + i\eta} \quad (47)$$

Definindo

$$\varepsilon_1 = \frac{\omega}{\omega_1} \quad (48)$$

resulta, de (48) em (47), que

$$\bar{T}_1(\omega) = \frac{1 + i\eta}{(1 - \varepsilon_1^2) + i\eta} \quad (49)$$

Assim, o módulo da transmissibilidade complexa $\bar{T}_1(\omega)$ será dado por

$$T_1(\omega) = |\bar{T}_1(\omega)| = \sqrt{\frac{1 + \eta^2}{(1 - \varepsilon_1^2)^2 + \eta^2}} \quad (50)$$

Essa expressão pode ser usada para se projetar o sistema de isolamento, como se verá mais adiante.

Considere-se, agora, a variação da rigidez equivalente complexa \bar{k} com a frequência. Nesse caso, em lugar da expressão (44), passa-se a ter

$$\bar{k}(\omega) = k(\omega)[1 + i\eta(\omega)] \quad (51)$$

Substituindo (51) em (45), obtém-se então

$$\bar{T}_2(\omega) = \frac{k(\omega)[1 + i\eta(\omega)]}{k(\omega)[1 + i\eta(\omega)] - m\omega^2} = \frac{k(\omega)[1 + i\eta(\omega)]}{k(\omega)\left[1 - \frac{m\omega^2}{k(\omega)} + i\eta(\omega)\right]} = \frac{[1 + i\eta(\omega)]}{\left[1 - \frac{m\omega^2}{k(\omega)} + i\eta(\omega)\right]} \quad (52)$$

Se ω_2 for uma frequência característica tal que

$$\omega_2^2 = \frac{k(\omega_2)}{m} \quad (53)$$

de modo que possa definir

$$\varepsilon_2 = \frac{\omega}{\omega_2} \quad (54)$$

e

$$r(\omega) = \frac{k(\omega_2)}{k(\omega)} \quad (55)$$

resulta, ao levar (53), (54) e (55) em (52), que

$$\bar{T}_2(\omega) = \frac{1 + i\eta(\omega)}{\left\{ \left[1 - \frac{k(\omega_2)}{k(\omega)} \frac{m\omega^2}{k(\omega_2)} \right] + i\eta(\omega) \right\}} = \frac{1 + i\eta(\omega)}{\left[1 - r(\omega)\varepsilon_2^2 \right] + i\eta(\omega)} \quad (56)$$

O módulo de transmissibilidade $\bar{T}_2(\omega)$, em que a dependência em frequência de \bar{k} já é considerada, é dado por

$$T_2(\omega) = |\bar{T}_2(\omega)| = \sqrt{\frac{1 + [\eta(\omega)]^2}{[1 - r(\omega)\epsilon_2^2]^2 + [\eta(\omega)]^2}} \quad (57)$$

expressão que também pode ser empregada no projeto do sistema de isolamento.

Introduza-se, por fim, a dependência em temperatura da rigidez equivalente complexa \bar{k} , que será, então, expressa por

$$\bar{k}(\omega, T) = k(\omega, T)[1 + i\eta(\omega, T)] \quad (58)$$

onde T é a temperatura.

Seguindo os passos anteriores, a transmissibilidade complexa correspondente será dada por

$$\bar{T}_3(\omega) = \frac{1 + i\eta(\omega, T)}{\left\{ \left[1 - \frac{m\omega^2}{k(\omega, T)} \right] + i\eta(\omega, T) \right\}} \quad (59)$$

Fazendo

$$\omega_3^2 = \frac{k(\omega_3, T)}{m} \quad (60)$$

$$\epsilon_3 = \frac{\omega}{\omega_3} \quad (61)$$

e

$$r(\omega, T) = \frac{k(\omega_3, T)}{k(\omega, T)} \quad (62)$$

resulta que

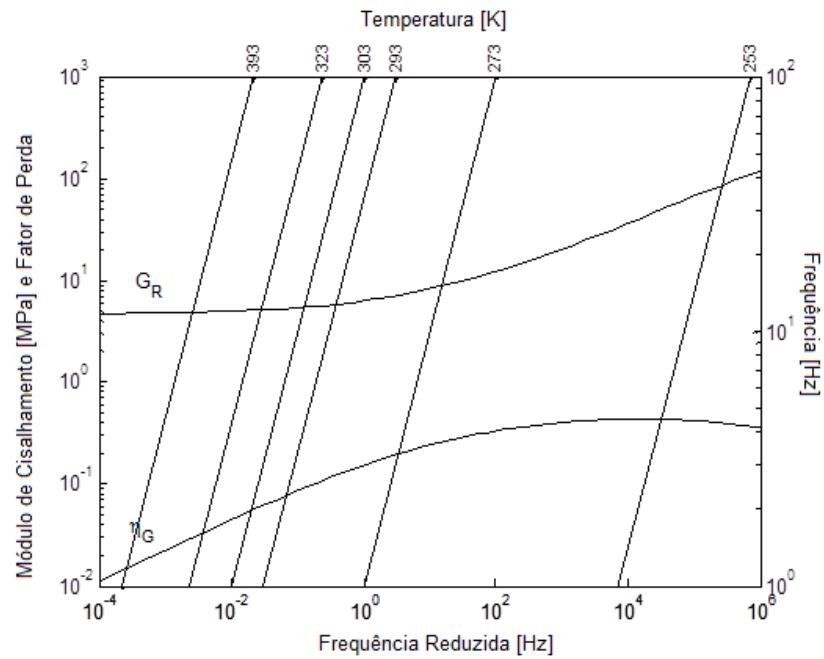
$$\bar{T}_3(\omega, T) = \frac{1 + i\eta(\omega, T)}{\left\{ \left[1 - \frac{k(\omega_3, T_t)}{k(\omega, T)} \frac{m\omega^2}{k(\omega_3, T)} \right] + i\eta(\omega, T) \right\}} = \frac{1 + i\eta(\omega, T)}{[1 - r(\omega, T)\epsilon_3^2] + i\eta(\omega, T)} \quad (63)$$

O módulo da transmissibilidade $\bar{T}_3(\omega, T)$, em que a dependência em temperatura de \bar{k} é considerada, é

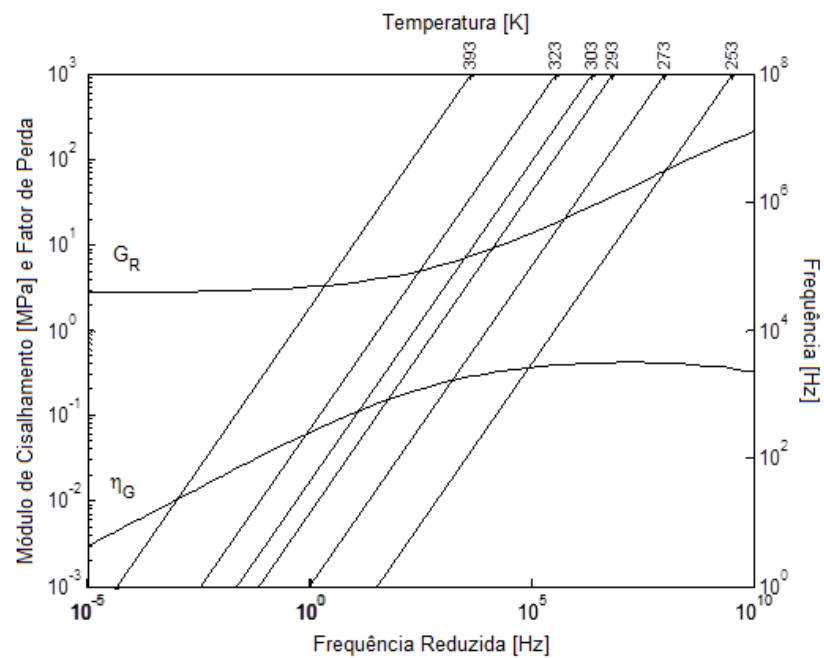
$$T_3(\omega, T) = |\bar{T}_3(\omega, T)| = \sqrt{\frac{1 + [\eta(\omega, T)]^2}{[1 - r(\omega, T)\epsilon_3^2]^2 + [\eta(\omega, T)]^2}} \quad (64)$$

Retornando ao exemplo em questão, tem-se que, para uma redução de 80%, o módulo da transmissibilidade correspondente, que relaciona as amplitudes de vibração, deve ser igual a 0,2. Ou seja, a amplitude de vibração do equipamento deve ser 20% da amplitude de vibração da plataforma, na frequência de interesse. Em dB, esse módulo seria aproximadamente igual a -14dB (ref. 1m/N).

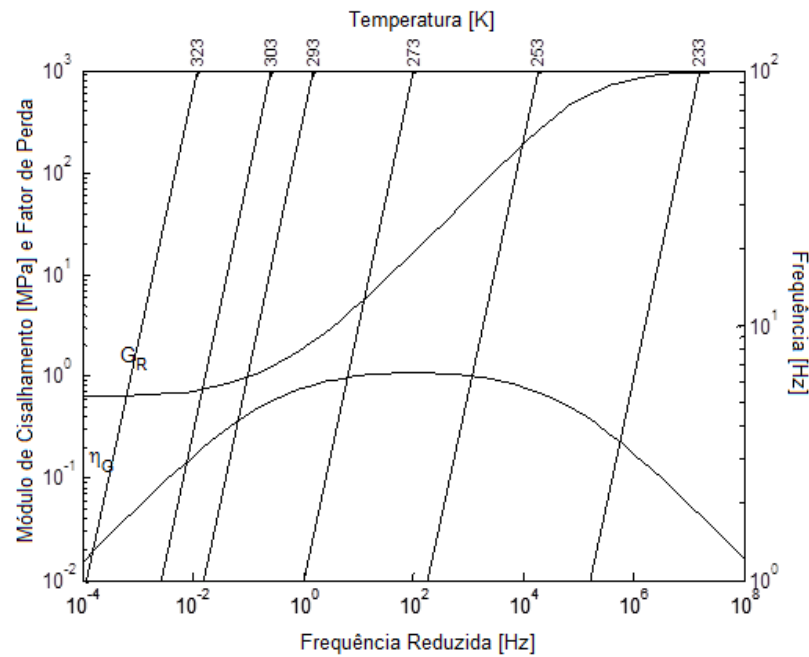
Em vista do ambiente em que o equipamento se encontra, e das limitações de espaço para a inserção do sistema de isolamento, serão empregados 4 isoladores, trabalhando em paralelo e ao cisalhamento, como mostrado mais adiante. Serão ainda consideradas as seguintes opções de material viscoelástico: neoprene, borracha natural e EAR C-1002. Estes materiais, de natureza elastomérica, são eleitos por serem de uso corrente tanto em isoladores quanto em outros dispositivos para controle de vibrações. Os nomogramas desses materiais encontram-se abaixo, nas figuras 10, 11 e 12.

FIGURA 10 – NOMOGRAMA DO NEOPRENE.

FONTE: O Autor.

FIGURA 11 – NOMOGRAMA DA BORRACHA NATURAL.

FONTE: O Autor.

FIGURA 12 – NOMOGRAMA DO EAR C-1002.

FONTE: O Autor.

Caso se considere, num primeiro momento, que as propriedades dinâmicas dos materiais viscoelásticos de interesse sejam constantes, é possível projetar os isoladores para a frequência e temperatura de trabalho da seguinte forma. Toma-se o fator de perda do material e obtém-se, a partir da expressão (50), o valor da razão entre frequências ε_1 que satisfaça o valor desejado para o módulo de transmissibilidade. Desse valor de ε_1 , e da frequência de trabalho, calcula-se a frequência ω_1 . Para isoladores trabalhando em paralelo e ao cisalhamento, a frequência ω_1 é tal que (GENT, 2001)

$$\omega_1^2 = \frac{n \alpha G}{m} \quad (65)$$

onde n é o número de isoladores, α é o fator geométrico dos isoladores, m é massa do equipamento e G é o módulo real de cisalhamento do material. Tanto o fator de perda quanto o módulo real de cisalhamento podem ser obtidos dos nomogramas dos materiais, utilizando os dados da frequência e da temperatura de trabalho. Alternativamente, pode-se empregar a equação (28), adequada para o

módulo complexo de cisalhamento, particularizada para as condições de trabalho e com os parâmetros do material empregado.

Da equação (65), decorre que

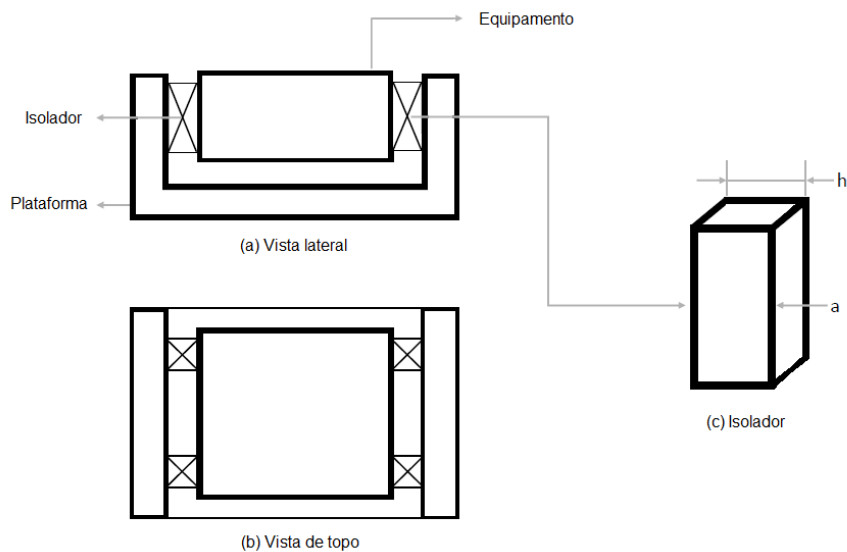
$$\alpha = \frac{\omega_1^2 m}{nG} \quad (66)$$

Para isoladores ao cisalhamento, cujos elementos viscoelásticos sejam paralelepípedos regulares, o fator geométrico α pode ser obtido de

$$\alpha = \frac{A}{h} \quad (67)$$

onde A é a área do elemento em contato com o equipamento e h é a espessura do elemento. Recomenda-se que $h = (0,10 \text{ a } 1,15) d$, onde d é a deflexão estática experimentada pelo elemento viscoelástico, em função do peso do equipamento. Os valores de n , A e h serão determinados, então, de forma iterativa, de modo a satisfazer o valor de ω_1 . A figura 13 apresenta, de forma esquemática, a montagem do equipamento com os respectivos isoladores.

FIGURA 13 – EQUIPAMENTO COM ISOLADORES AO CISALHAMENTO.

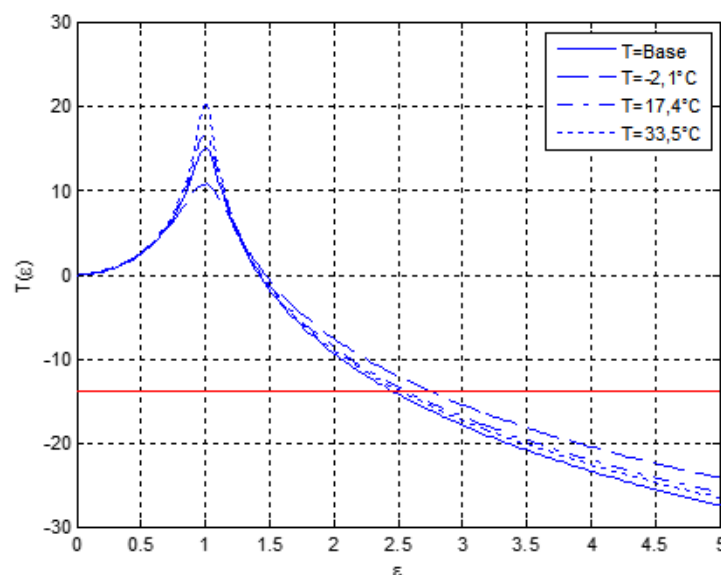


FONTE: O Autor.

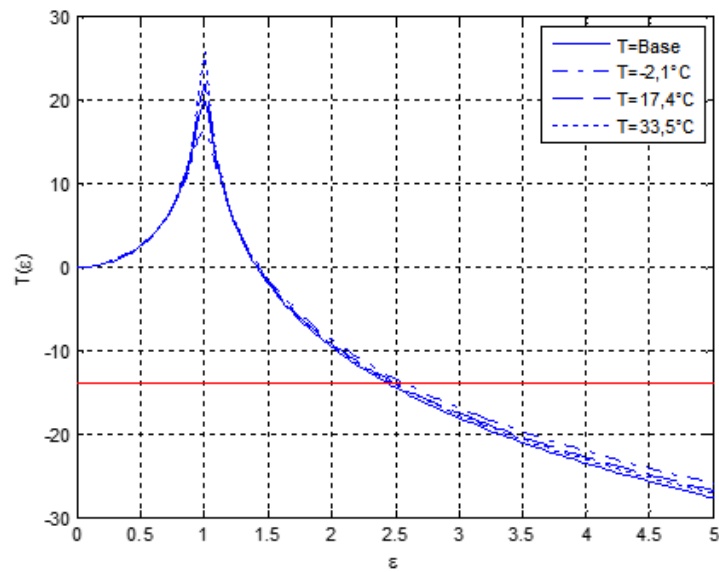
As figuras 14 a 16 mostram, em linha cheia, as curvas do módulo da transmissibilidade para o cálculo da razão entre frequências ε_1 , com o valor desejado indicado por uma linha reta. Recorda-se que, para esses casos, as propriedades dos materiais selecionados foram consideradas constantes, tanto em frequência quanto em temperatura. Essas curvas foram levantadas considerando a temperatura base de 17,4°C, que foi, em 2013, segundo o Instituto Nacional de Meteorologia, a temperatura média de Curitiba, PR.

Assuma-se, agora, que os isoladores já tenham sido projetados (já possuindo, portanto, seus respectivos fatores geométricos) e se deseje verificar os efeitos, no isolamento, das variações em frequência e temperatura. Também segundo o Instituto Nacional de Meteorologia, a cidade de Curitiba teve, durante o ano de 2013, temperatura máxima de 33,5°C e temperatura mínima de -2,1°C, além da temperatura média de 17,4°C. Considerando todas essas temperaturas e também a dependência em frequência, novas curvas de módulo de transmissibilidade são obtidas. Essas curvas também são mostradas nas figuras 14 a 16, para os materiais em tela.

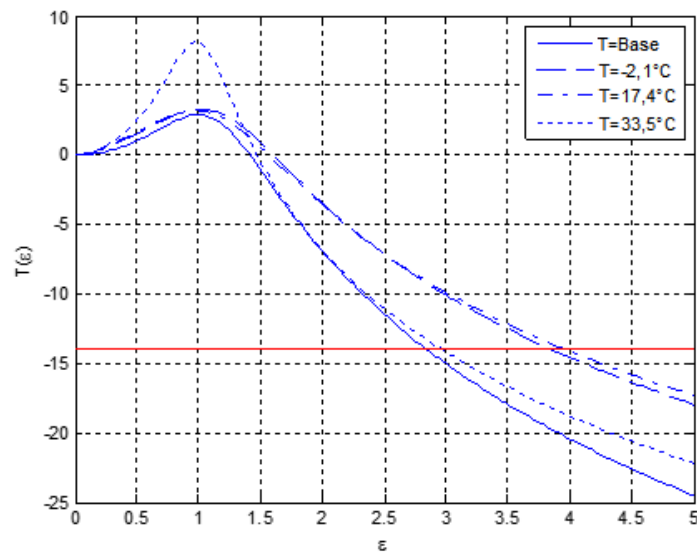
FIGURA 14 – MÓDULO DA TRANSMISSIBILIDADE - ISOLADORES DE NEOPRENE.



FONTE: O Autor.

FIGURA 15 – MÓDULO DA TRANSMISSIBILIDADE - ISOLADORES DE BORRACHA NATURAL.

FONTE: O Autor.

FIGURA 16 – MÓDULO DA TRANSMISSIBILIDADE - ISOLADORES DE EAR C-1002.

FONTE: O Autor.

Através da análise dos gráficos das figuras 14 a 16, verifica-se que, na região de isolamento ($\varepsilon > \sqrt{2}$), as novas curvas estão acima da curva relativa à temperatura base em que as propriedades dinâmicas foram assumidas como constantes em frequência e temperatura. Isto ocorre para todos os materiais e quer dizer que o isolamento alcançado nessas condições, para um certo valor de ε , é

sempre menor do que o desejado. Assim sendo, decorre que o valor de ε necessário para se alcançar o valor desejado de módulo de transmissibilidade, nos diversos casos, é sempre maior que o valor de ε no caso base. Consequentemente, para um valor maior de ε , seria necessário um valor menor de frequência característica.

Constata-se, portanto, que, ao não levar em conta a variação em temperatura e frequência no projeto de isolamento, fica-se sujeito a cometer equívocos no dimensionamento (ou especificação) dos isoladores. Neste sentido, entende-se que a consideração ampla das propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos, em sua variação em frequência e temperatura, é essencial para projetos de controle de vibrações.

3 INFERÊNCIA BAYESIANA E MÉTODOS MCMC

3.1 INFERÊNCIA BAYESIANA

Os métodos estatísticos são, dentre outros, ferramentas para investigação científica. A inferência estatística é o processo no qual se utilizam dados para inferir sobre a distribuição de probabilidades que gerou os dados (WASSERMAN, 2004). Pode-se considerar que as conclusões obtidas a partir da inferência estatística incorporam a incerteza das informações sujeitas a aleatoriedade (COX, 1958).

A abordagem de inferência bayesiana é baseada no teorema de Bayes, enunciado originalmente por Bayes, porém publicado postumamente por Price, em 1763 (BAYES e PRICE, 1763). A interpretação bayesiana de probabilidade foi desenvolvida posteriormente, de forma mais profunda, por Laplace, em 1814 (SIMON e LAPLACE, 1951). A principal característica do método consiste em realizar a inferência estatística incorporando o conhecimento anterior do pesquisador a respeito do fenômeno, ou do parâmetro θ de interesse e combinando esse conhecimento com dados observados, através de experimentos ou medições, de forma a atualizar o conhecimento prévio.

O conhecimento anterior é refletido na chamada distribuição a priori do parâmetro, denotada por $p(\theta)$. Após observar um conjunto de dados y , crenças anteriores são atualizadas e a incerteza sobre o parâmetro passa a ser representada pela distribuição a posteriori $p(\theta|y)$. A informação referente aos dados observados está resumida numa função conhecida como função de verossimilhança e denotada por $p(y|\theta)$. Sendo y e θ tratados como variáveis aleatórias, a aplicação do teorema de Bayes proporciona realizar inferência sobre o parâmetro θ por intermédio da distribuição a posteriori $p(\theta|y)$, que é a resposta fornecida pela inferência bayesiana.

A distribuição a posteriori revela a informação completa sobre os valores dos parâmetros e indica a credibilidade relativa de cada combinação de valores dos parâmetros. Ela, como resultado, é sempre um compromisso entre a probabilidade a priori e a verossimilhança do valor do parâmetro para os dados.

Este modelo sugere que a inferência científica formal envolve uma parte que depende da crença subjetiva e da compreensão objetiva que o pesquisador tem antes de realizar o experimento, o chamado de conhecimento a priori, e outra parte que depende da observação dos dados propriamente ditos (PRESS, 2003). A ideia geral é que, ao utilizar o teorema de Bayes, a crença científica sobre algum fenômeno seja contabilizada no modelo como se fossem dados adicionais, sendo o modelo formalmente atualizado através de novas medições. Aprende-se a respeito do fenômeno e modifica-se o que já se conhecia ou acreditava a priori para obter um novo conhecimento, posterior, após realizar novas observações.

As medições de uma pesquisa científica costumam ter um nível de aleatoriedade devido a influências não conhecidas que podem afetar as medições, apesar do pesquisador controlar todas as variáveis conhecidas que estão envolvidas em um experimento. Sendo assim, os dados científicos costumam ter o que se chama de um grau de ruído em seu valor. Uma característica do método bayesiano é o uso de probabilidade para quantificar a incerteza no modelo de inferência estatística (GELMAN et al, 2004), possibilitando conhecer o ruído envolvido nas medições.

Segundo Kruschke (2015) a análise de inferência bayesiana pode ser realizada seguindo-se cinco passos. São eles:

1. Identificar os dados relevantes para as questões do estudo científico. É importante ter claro as variáveis de medição e a escala dos dados medidos.
2. Definir um modelo descritivo dos dados relevantes. A forma matemática e os parâmetros correspondentes devem ser significativos e apropriados para os propósitos teóricos da análise.
3. Definir as distribuições a priori dos parâmetros do modelo.
4. Utilizar a inferência bayesiana para realocar as probabilidades através dos valores dos parâmetros. Deve-se, então, interpretar as distribuições a posteriori obtidas, respeito as questões significativas da pesquisa, isso considerando que o modelo descreve bem os dados experimentais, ou observados.
5. Verificar se as predições a posteriori descrevem os dados com precisão razoável. Há que se conduzir, portanto, uma verificação da predição a

posteriori. Caso o modelo não descreva bem os dados, deve-se considerar o uso de outro modelo.

No presente estudo, busca-se realizar e apresentar estes cinco passos para análise bayesiana.

3.1.1 Distribuições a Priori

O conhecimento que se tem sobre um determinado parâmetro, antes de estimá-lo por meio de experimentos, medições ou observações, é descrito através da chamada distribuição a priori. Esta dependerá de um ou mais parâmetros, conforme o modelo proposto para descrever os dados. Tais parâmetros são chamados de hiperparâmetros, para distingui-los dos parâmetros do modelo.

Muitas vezes, a informação a priori não está disponível facilmente, mas sim nas mãos de um especialista da pesquisa científica em questão. Assim sendo, é necessário que as crenças pessoais a respeito da probabilidade de um evento sejam formuladas como uma função de probabilidade adequada.

Pode-se propor duas categorias gerais de prioris, informativas e não informativas (GILL, 2009). Segundo Gill (2009), os limites entre estas categorias não são bem definidos, portanto esta categorização é considerada artificial. A diferença entre priori informativa e não informativa tem um caráter relativo e não existe uma priori que seja completamente não informativa.

De toda forma, para fins da familiarização, entende-se que a priori informativa é aquela na qual as informações que se tem sobre o parâmetro de interesse θ são incorporadas na distribuição a priori. Ou seja, são dados adicionais que participam do modelo de inferência bayesiana. No caso de já se ter um modelo probabilístico atual similar a um modelo anterior, este é utilizado como informação a priori e combinado à obtenção de novos dados para atualizar o modelo anterior já existente.

A distribuição a posteriori de um parâmetro θ de um modelo de inferência anterior passa a ser usada como distribuição a priori em um modelo atual. Nesta situação, o ajuste do modelo probabilístico não é feito sob um estado completo de ignorância, e somente com base nos dados atuais, mas carrega sim, os efeitos

cumulativos de todos os dados, passados e presentes. Os métodos de resolução são conhecidos como métodos de elicitación da priori.

Caso não seja possível atualizar a priori a partir da posteriori obtida em um modelo anterior, mas haja informação suficiente sobre o modelo, para evitar resultados contraditórios sobre o conhecimento, pode-se considerar uma priori fracamente informativa ou vaga. A utilização desta priori evita o uso de informação que efetivamente não existe. Deve-se selecionar uma priori deste tipo com cautela, pois esta deve ter informação suficientemente adequada, para que os dados atuais possam contribuir efetivamente com a resposta final.

Existe também a classe de prioris conjugadas, que são consideradas como sendo muito informativas, além de convenientes sob muitos aspectos. É possível selecionar uma distribuição que é conjugada com a verossimilhança, de forma tal que, ao se realizar essa combinação, se obtém uma distribuição a posteriori da mesma família de distribuições de probabilidade. Seu uso é recomendado, sempre que possível e apropriado, devido à sua conveniência computacional.

Já a priori não informativa é caracterizada por não se ter uma informação palpável sobre a distribuição dos dados, ou pelo fato de que o conhecimento que se tem a priori não ser significativo em relação à informação amostral. Esta distribuição usualmente era considerada um estado de ignorância, mas atualmente ela é considerada como uma opção convencional, a qual se recorre quando a informação a priori for insuficiente e se torne difícil elicitar uma distribuição subjetiva considerada adequada (PAULINO et al, 2003).

É interessante utilizar este tipo de priori para que os dados observados possam contribuir mais na distribuição a posteriori. Há alguns métodos que podem ser utilizados para se encontrar a distribuição a priori não informativa, como o método de Bayes-Laplace, o método de Jeffreys, o método de Box Tiao e o método da entropia máxima (KASS e WASSERMAN, 1996; PAULINO et al, 2003).

Na prática, as categorias expostas acima estão longe de serem mutuamente exclusivas, sendo comum ver uma mistura de abordagens, combinando aspectos de conhecimento prévio, conveniência matemática e desejo de não afetar as conclusões finais com a influência da determinação da priori. Alguns críticos focam na natureza subjetiva da priori, porém todos os modelos estatísticos envolvem escolhas subjetivas (GILL, 2009). As prioris são uma forma de incorporar

conhecimento humano existente, quantitativo ou qualitativo, na especificação estatística. Na maioria das aplicações práticas, a distribuição a priori é vagamente informativa, uma vez que assim se tem mínima influência sobre o resultado da distribuição a posteriori.

A distribuição a priori não pode ser manipulada para se alcançar uma distribuição a posteriori desejada. Ela é explicitamente especificada e deve ser coerente com a área de pesquisa. A robustez das conclusões adquiridas através da distribuição a posteriori podem ser verificadas fazendo-se uma análise bayesiana com outra priori plausível, que possa estar de acordo com a opinião de pesquisadores ou sugestões.

Segundo Robert (2007), sem a distribuição a priori, ou seja, sem uma estrutura pré-estabelecida do mundo, a observação não faz sentido, já que ela não vem como um apoio ou um confronto a um modelo referencial. Sendo assim, a construção do conhecimento através da experimentação deve implicar a existência de um sistema de representação anterior, que, a princípio, será bastante incompleto, porém, será progressivamente atualizado, via realização de experimentos.

3.1.2 Função de Verossimilhança e Princípio da Verossimilhança

A função de verossimilhança permite que sejam estimados os parâmetros desconhecidos do modelo, com base nos valores observados para variáveis aleatórias definidas no experimento. A diferença para uma função densidade de probabilidade é que essa, contrário da função de verossimilhança, nos permite calcular probabilidades para uma dada variável aleatória, com base em parâmetros conhecidos.

A função de verossimilhança é construída com base a uma amostra aleatória $y = (y_1, \dots, y_n)$, onde cada y_i tem distribuição $p(y_i|\theta)$, $i=1, \dots, n$. Sendo visto como uma função do parâmetro desconhecido θ . Desta forma denota-se a função de verossimilhança como sendo $L(\theta, y) = \prod_i p(y_i|\theta)$. Desta forma enfatiza-se que a verossimilhança é uma função do parâmetro θ . Matematicamente tem-se que

$$L(\theta; y_1, \dots, y_n) = P(y_1, \dots, y_n | \theta) \quad (68)$$

para todo θ e y_i . Assim sendo, a função de verossimilhança de θ tem a mesma formulação matemática que a densidade de probabilidade da variável resposta y . Quando vista como uma função do parâmetro θ com y fixo, é a função de verossimilhança comumente denotada por $L(\theta | y)$. Quando vista como uma função de y com o parâmetro θ fixo, não é uma função de verossimilhança, mas sim uma função densidade de probabilidade. É importante ressaltar que a variável de interesse na função de verossimilhança é o parâmetro θ , e não y (PRESS, 2003). A função de verossimilhança não é uma probabilidade e não obedece às propriedades da probabilidade.

Para ilustrar estas relações, pode-se utilizar o exemplo apresentado em Press (2003). Suponha uma distribuição binomial, em que o número de sucessos é dado por $r = \sum_{i=1}^n Y_i$, em n ensaios independentes Bernoulli, sendo o resultado Y_i do i -ésimo ensaio tal que $Y_i \in \{0, 1\}$. A função densidade de probabilidade (ou função massa de probabilidade) correspondente é dada por

$$p(r | \theta) = \binom{n}{r} \theta^r (1 - \theta)^{n-r}, \quad r=1, \dots, n \quad (69)$$

No entanto, se o coeficiente $\binom{n}{r}$ em (69) for ignorado, pode-se escrever a função de verossimilhança como

$$L(\theta | r) = \theta^r (1 - \theta)^{n-r} \quad (70)$$

para enfatizar que o interesse está focado em θ , sendo que o coeficiente da distribuição binomial não tem papel importante na inferência bayesiana. Note-se que

$$L(\theta | r) \text{ e } p(r | \theta) \text{ diferem somente pela constante de proporcionalidade } \binom{n}{r}.$$

Suponha-se, agora, que se deseja fazer inferências a respeito de um parâmetro de interesse θ . Dois conjuntos de dados observados relacionados ao parâmetro θ , Y_1 e Y_2 , têm funções de verossimilhança proporcionais uma à outra, e a constante de proporcionalidade não depende de θ . Então, eles devem gerar conclusões inferenciais idênticas sobre o parâmetro θ . Este fato chama-se princípio da verossimilhança.

Existem duas versões para este princípio. A versão fraca, onde Y_1 e Y_2 surgem de um modelo de probabilidade comum, e a versão forte, onde os modelos de probabilidade são diferentes, porém os conjuntos estão relacionados a um parâmetro e espaço paramétrico em comum (BARNETT, 1999).

Este princípio afirma que toda a informação contida nos dados experimentais observados a respeito do parâmetro desconhecido θ , que é necessária para a inferência sobre o parâmetro, está disponível a partir da função de verossimilhança (BERGER e WOLPERT, 1988). As informações sobre como o experimento foi realizado ou conduzido não são relevantes para a inferência, uma vez que essas informações não aparecem na função de verossimilhança. Aderir ao princípio da verossimilhança significa concordar que as inferências são condicionais aos dados observados e que a função de verossimilhança é parametrizada pelos dados (ROSSI et al, 2005).

Na abordagem bayesiana, a contribuição dos resultados experimentais para determinação da distribuição a posteriori é sempre caracterizada pela função de verossimilhança e segue o princípio da verossimilhança (BIRNABAUM, 1962).

3.1.3 Teorema de Bayes

O desenvolvimento da inferência bayesiana está centrado na aplicação do teorema de Bayes. A distribuição de probabilidade a posteriori de um evento aleatório é definida como a probabilidade condicional que é atribuída ao evento após ter sido considerado uma evidência relevante. Caso exista uma evidência experimental de um dado fenômeno probabilístico, a distribuição de probabilidade a posteriori relaciona essa evidência com alguma variável aleatória. Por exemplo, caso uma variável aleatória tenha uma distribuição normal $X \sim (\mu, \sigma)$, a distribuição de

probabilidade a posteriori será indicada por $p \sim (\mu, \sigma | x)$. Esta distribuição permite calcular a probabilidade do par (μ, σ) , dado um certo valor de x .

Suponha-se que se está interessado nos valores de k quantidades desconhecidas, onde $k = 1, 2, \dots$, e que o conhecimento prévio a respeito desses valores é expresso por meio de uma função distribuição de probabilidade $p(\theta)$, sendo θ o parâmetro de interesse. Suponha-se também que $y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ é o resultado de n observações relevantes sobre a variável aleatória de interesse, que tem uma distribuição de probabilidade que depende do vetor θ de parâmetros desconhecidos. Os componentes de y são variáveis aleatórias e a dependência de y em θ pode ser expressa por meio de $p(y | \theta)$, a função de verossimilhança.

O teorema de Bayes é a ferramenta que atualiza o conhecimento prévio sobre o parâmetro utilizando os dados observados (GILL, 2009). Em vista dele, tem-se que as quantidades em questão são relacionadas da seguinte forma:

$$p(\theta | y) = \frac{p(\theta, y)}{p(y)} = \frac{p(\theta)p(y | \theta)}{p(y)} \quad (71)$$

onde $p(y) = \sum_{\theta} p(\theta)p(y | \theta)$ é a soma sobre todos os possíveis valores de θ , para o caso discreto, enquanto que, para o caso de θ contínuo, $p(y) = \int p(\theta)p(y | \theta)d\theta$.

Nesta abordagem, a equação (71) é escrita omitindo-se o fator $p(y)$, já que ele não depende do parâmetro θ , sendo considerado uma constante normalizadora, que não altera as probabilidades relativas de θ . Desta forma, na inferência bayesiana, é comum que o teorema de Bayes seja apresentado por (GILL, 2009; MIGON et al, 2015)

$$p(\theta | y) \propto p(\theta)p(y | \theta) \quad (72)$$

O termo $p(\theta)$ é chamado de distribuição a priori do parâmetro de interesse e, combinado a função de verossimilhança $p(y | \theta)$, conforme o lado direito da equação (72), gera $p(\theta | y)$, que é chamada função distribuição a posteriori. A inferência

bayesiana reflete o conhecimento sobre o parâmetro de interesse através da distribuição a posteriori.

Pode-se entender a inferência bayesiana como um processo, baseado no teorema de Bayes para distribuição de probabilidades, que estima a densidade de probabilidade a posteriori, utilizando o conhecimento a priori sobre os parâmetros. Ela atualiza a estimativa da posteriori por meio da função de verossimilhança, quando novas observações são adquiridas.

A estrutura da distribuição a posteriori pode ser bastante complexa e, em decorrência, o problema de integração pode se tornar complexo também. Neste caso, faz-se necessária a utilização de técnicas de aproximações de integrais, para a implementação do método bayesiano. A abordagem comumente utilizada é através de técnicas de simulação estocástica conhecidas como métodos de Monte Carlo via cadeias de Markov, que serão abordados na seção 3.2. Antes, contudo, são necessárias algumas considerações complementares, no âmbito da inferência bayesiana, sobre intervalos de confiabilidade e reamostragem.

3.1.4 Intervalos de Credibilidade

Os intervalos de confiabilidade são análogos aos intervalos de confiança da inferência clássica. Ao tratar de inferência bayesiana, alguns autores utilizam a denominação de intervalos de credibilidade para dissociar os conceitos, já que os intervalos de credibilidade têm um significado diferente dos intervalos de confiança calculados pela inferência clássica.

A definição de Migon et al (2015) para intervalos de credibilidade é que, dada uma quantidade desconhecida θ , definida em Θ , uma região $C \subset \Theta$ tem $100(1-\alpha)\%$ de credibilidade para θ se a probabilidade $P(\theta \in C | x) \geq 1-\alpha$. Neste caso, $1-\alpha$ é chamado de credibilidade ou nível de confiança e a região C , no caso escalar, normalmente é dada por um intervalo, por exemplo, $[c_1, c_2]$. Por esta definição, os intervalos com $100(1-\alpha)\%$ de credibilidade são associados à distribuição a posteriori de θ .

Kruschke (2015) denomina o intervalo de credibilidade de interesse da distribuição a posteriori de intervalo de maior densidade ou em sua sigla em inglês

HDI (*highest density interval*). Isso se deve ao fato de que o intervalo indica quais pontos da distribuição são mais prováveis, abrangendo a maior parte da distribuição. Portanto, cada ponto dentro do intervalo tem maior probabilidade de ocorrer que qualquer ponto fora dele. Esta denominação é adotada no presente estudo.

3.1.5 *Bootstrap* Bayesiano (BB)

A reamostragem é uma técnica estatística que permite a avaliação da variabilidade de estatísticas, com base nos dados de uma única amostra existente.

O método de reamostragem *Bootstrap* foi introduzido por Efron (1979) e posteriormente desenvolvido por Efron e Tibshirani (1993). *Bootstrap* significa que uma amostra disponível dá origem a várias outras, com o propósito de aproximar a distribuição amostral de uma estatística. Para entender o método, suponha que seja possível extrair amostras repetidas, e de mesmo tamanho, da população de interesse, um grande número de vezes. Através dos valores recorrentes das amostras repetidas, é possível obter um resultado bem aproximado da distribuição amostral de uma estatística de interesse, como por exemplo, a média. Porém, ao realizar um estudo por amostragem, isto seria inviável, já que o objetivo da amostragem é representar a informação de uma população alvo de forma eficiente, sob restrições de tempo e custo.

O método *Bootstrap* pode ser utilizado tanto nas análises de estatísticas não paramétricas quanto paramétricas, de acordo com o problema. Para o caso não paramétrico, faz-se a reamostragem dos dados com reposição, de acordo com uma distribuição empírica estimada. No caso paramétrico, como existe um modelo probabilístico sobre a distribuição dos dados, o método *Bootstrap* retira as amostras diretamente da distribuição conhecida.

O *Bootstrap* Bayesiano (BB) (RUBIN, 1981) é o método equivalente na inferência bayesiana ao método *Bootstrap* clássico (EFRON, 1979), porém, o seu propósito é aproximar a distribuição a posteriori de θ . Seja, então, y_1, y_2, \dots, y_n uma amostra independente e identicamente distribuída de n realizações das variáveis aleatórias Y_1, Y_2, \dots, Y_n , que seguem uma distribuição arbitrária e desconhecida F . Seja θ um parâmetro da distribuição F . Por simplicidade, assume-se Y_1 como

unidimensional e θ como um escalar, ainda que os dois possam ser vetores. Por fim, seja $\hat{\theta}$ uma estimativa de θ , baseada na amostra y_1, y_2, \dots, y_n .

Sabe-se que o método *Bootstrap* pode ser utilizado para aproximar a distribuição de $\hat{\theta}$. Contudo, no modelo bayesiano, ao invés de amostrar cada y_i independentemente, com reposição e igual probabilidade $1/n$, o BB usa a distribuição de probabilidade a posteriori para as variáveis aleatórias Y_i 's. Esta distribuição de probabilidade a posteriori é centrada em $1/n$ para cada Y_i , mas a probabilidade de seleção muda de amostra para amostra. Considere isto como um vetor n -dimensional com média obtida assinalando pesos iguais a $1/n$ para cada Y_i , mas a proporção atual para cada Y_i no k -ésimo sorteio é sorteada da distribuição a posteriori.

Especificamente, uma replicação do BB é gerada sorteando $n-1$ variáveis aleatórias da distribuição uniforme no intervalo $[0,1]$, denotando os valores ordenados do mínimo para o máximo como $u_{(1)}, u_{(2)}, \dots, u_{(n-1)}$, e definindo $u_{(0)} = 0$ e $u_{(n)} = 1$. Deve-se calcular as probabilidades $g_i = u_{(i)} - u_{(i-1)}$ para $i = 1, 2, \dots, n$, desta forma $\sum_{i=1}^n g_i = 1$, onde os g_i 's são chamados de espaços uniformes ou "gaps". Então, $g = (g_1, \dots, g_n)$ é o vetor de probabilidades de seleção, associadas a amostra y_1, y_2, \dots, y_n , em uma determinada replicação BB. Considerando todas as replicações do BB são obtidas as distribuições referentes ao BB para a variável aleatória Y_i (RUBIN, 1981).

3.2 MÉTODOS DE MONTE CARLO VIA CADEIAS DE MARKOV (MCMC)

A utilização da abordagem bayesiana esteve, durante muitos anos, limitada à utilização de distribuições a priori e funções de verossimilhanças que resultassem em uma distribuição a posteriori possível de ser determinada analiticamente. Isto se devia a falta de métodos numéricos que permitissem calcular integrais complexas (ROSSI et al, 2005). Alguns métodos baseados em aproximações assintóticas foram propostos, tais como as aproximações de Laplace, as aproximações via quadratura

Gaussiana e os métodos baseados em simulação estocástica (GAMERMAN e LOPES, 2006; TANNER, 2006). Porém, a aplicação do método bayesiano começou a se difundir e se desenvolver a partir da introdução dos métodos de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC, em sua abreviação para a nomenclatura em inglês *Markov Chain Monte Carlo*).

Uma cadeia de Markov é um processo estocástico aonde a probabilidade de fazer uma transição de um estado atual $\theta^{[t]}$ para um novo estado depende somente do estado atual, sendo independente dos valores anteriores. Pode-se escrever formalmente que $p(\theta^{[t]} \in A \mid \theta^{[0]}, \theta^{[1]}, \dots, \theta^{[t-2]}, \theta^{[t-1]}) = p(\theta^{[t]} \in A \mid \theta^{[t-1]})$, onde A é o conjunto de eventos ou intervalo de eventos no espaço de estado completo. Independente do estágio inicial, pode-se gerar uma trajetória e alcançar uma distribuição de equilíbrio $p(y)$.

Recorda-se que um processo estocástico é um conjunto consecutivo de variáveis aleatórias que está definido em um espaço conhecido, por exemplo, Θ , e com ordem também conhecida, sendo então denotada por $\{\theta^{[t]} : t \in T\}$. O espaço de estado ou espaço paramétrico está relacionado ao intervalo de valores permitido para o vetor aleatório de parâmetros de interesse. Normalmente T é o conjunto de inteiros positivos espaçado pelo intervalo de tempo, de modo que o processo pode ser indicado por $\{\theta^{[t=0]}, \theta^{[t=1]}, \theta^{[t=2]}, \dots\}$.

Quando a distribuição a posteriori tem uma forma muito complexa ou desconhecida, utiliza-se o método de MCMC para simular amostras desta distribuição, que é a distribuição de interesse. O objetivo é utilizar o MCMC para gerar amostras da distribuição a posteriori $f(\theta \mid y)$, tal que $f(\theta \mid y)$ seja a distribuição estacionária da cadeia.

3.2.1 Métodos de MCMC para Inferência Bayesiana

Os métodos de MCMC mais aplicados em inferência bayesiana são o método de Metropolis-Hastings, que tem sua origem no algoritmo de Metropolis (METROPOLIS et al. 1953), tendo sido posteriormente generalizado por Hastings (HASTINGS, 1970), e o amostrador de Gibbs, proposto por Geman e Geman (1984) e popularizado no início dos anos 90 por Gelfand e Smith (1990). Na sequência,

esses métodos são concisamente apresentados. Para uma descrição detalhada, recomenda-se Gamerman e Lopes (2006).

3.2.1.1 Algoritmo de Metropolis-Hastings

O algoritmo de Metropolis-Hastings (METROPOLIS et al 1953; HASTINGS, 1970) é uma técnica para gerar amostras aleatórias de uma distribuição sem que se conheça a sua densidade. O algoritmo amostra valores da distribuição alvo, que são gerados através de um passeio aleatório no espaço paramétrico, iniciando em um ponto arbitrário indicado pelo usuário. O passeio aleatório progride a cada intervalo de tempo propondo um movimento para uma nova posição no espaço paramétrico movimento esse que é avaliado por uma metodologia de aceitação-rejeição. Com intuito de explorar de forma eficiente as regiões do espaço paramétrico em que a distribuição do parâmetro de interesse $p(\theta)$ tem a maior densidade, as distribuições propostas podem tomar diferentes formas.

O algoritmo gera uma cadeia de Markov, em que a realização da variável aleatória do estado atual depende somente do estado anterior. Para entender seu funcionamento, seja $p(\theta)$ a distribuição de interesse, $\theta^{(j)}$ o valor atual e $q(\theta, \theta^{(j)})$ a distribuição proposta, ou distribuição geradora de valores candidatos. Assim, o esquema de amostragem é o seguinte:

1 – Amostrar um valor candidato da distribuição proposta, $\theta^* \sim q(\theta, \theta^{(j)})$;

2 – Calcular a probabilidade de aceitar o valor candidato amostrado,

$$\alpha(\theta^{(j)}, \theta^*) = \min \left\{ 1, \frac{p(\theta^*) | q(\theta^{(j)}, \theta^*)}{p(\theta^{(j)}) | q(\theta^*, \theta^{(j)})} \right\} ;$$

3 – Definir $\theta^{(j+1)} = \theta^*$ com probabilidade $\alpha(\theta^{(j)}, \theta^*)$; caso contrário definir $\theta^{(j+1)} = \theta^{(j)}$;

4 – Repetir o processo até alcançar convergência.

A convergência da cadeia é atingida sob certas condições de regularidade, que são a irreducibilidade e a aperiodicidade (CHIB e GREENBERG, 1995).

Informações mais detalhadas sobre a metodologia de Metropolis-Hastings são encontradas em Brooks et al (2011) e Chib e Greenberg (1995).

3.2.1.2 Amostrador de Gibbs

O algoritmo de Metropolis-Hastings é amplamente aplicável, porém, para que ele funcione adequadamente, a distribuição proposta deve estar devidamente adequada com a distribuição a posteriori. Se a distribuição proposta for muito estreita ou muito larga, é possível que uma grande proporção de movimentos propostos seja rejeitada e a trajetória ficará estancada em uma região localizada do espaço paramétrico.

O amostrador de Gibbs surge, então, como uma opção mais eficiente. Ele também é um tipo de passeio aleatório através do espaço amostral, que é iniciado de um ponto arbitrário indicado pelo usuário. Em cada ponto do passeio aleatório, o próximo passo irá depender apenas da posição atual.

Neste sistema de amostragem, as probabilidades de transição dos estados são realizadas a partir das distribuições de condicionais completas. Para melhor entendimento dessa afirmação, considere-se que, do teorema de Bayes, pode-se escrever a densidade de probabilidade a posteriori da seguinte forma:

$$p(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n | y) = p(\theta_1 | \theta_2, \dots, \theta_n, y) p(\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_n | y) \quad (73)$$

Isto significa que, amostrando cada condicional completa em turno, obtêm-se valores proporcionais à distribuição a posteriori. O amostrador de Gibbs utiliza esta relação para amostrar iterativamente cada variável, deixando a outra variável no seu estado anterior no tempo. Os parâmetros componentes são selecionados em ordem, uma vez, que para modelos complexos, com um grande número de parâmetros, seriam necessários muitos passos para se visitar todos os parâmetros de forma quase igual, a longo prazo.

Trata-se, então, de um caso especial do algoritmo de Metropolis-Hastings, onde a distribuição proposta depende da localização no espaço paramétrico e do parâmetro componente selecionado. Após um parâmetro componente ter sido selecionado em um ponto, tem-se então que a distribuição proposta para o próximo

valor correspondente a esse parâmetro será a probabilidade condicional a posteriori do mesmo. Sendo a distribuição proposta um espelho da probabilidade a posteriori desse parâmetro, o movimento proposto será sempre aceito. O amostrador de Gibbs é de grande utilidade, sobretudo quando a posteriori conjunta completa não pode ser determinada analiticamente e, desta forma, não pode ser diretamente amostrada, porém todas as distribuições condicionais podem ser determinadas e amostradas diretamente.

O amostrador de Gibbs se divide em duas etapas, sendo que a primeira visa obter formas analíticas para cada condicional completa, e a segunda visa gerar amostras iterativamente com uma abordagem de Markov, de modo que as amostras tendam para as densidades a posteriori. Para ilustrar o seu funcionamento, seja $p_i(\theta_i | \theta_{-i})$ uma função densidade condicional de θ_i . Dados os valores de todos os outros θ_j 's ($j \neq i$), assumamos que é possível amostrar valores destas distribuições para cada $i = 1, \dots, n$. Dessa forma o esquema de amostragem é o seguinte:

1 – Escolher um vetor de valores iniciais para as variáveis aleatórias, a partir das distribuições a priori das variáveis $\theta^0 = (\theta_1^0, \dots, \theta_n^0)$, para todos os parâmetros desconhecidos do modelo.

2 – Gerar $\theta_1^{(j+1)}$ de $p_1(\theta_1 | \theta_2^{(j)}, \dots, \theta_n^{(j)})$;

3 – Gerar $\theta_2^{(j+1)}$ de $p_2(\theta_2 | \theta_1^{(j+1)}, \theta_3^{(j)}, \dots, \theta_n^{(j)})$;

4 – Repetir sucessivamente os passos 2 e 3 para $i = 3, \dots, n$, sendo que no último passo, gera-se $\theta_p^{(j+1)}$ de $p_p(\theta_p | \theta_1^{(j+1)}, \theta_2^{(j+1)}, \dots, \theta_{n-1}^{(j+1)})$, obtendo-se o vetor $\theta^{(j+1)} = (\theta_1^{(j+1)}, \dots, \theta_p^{(j+1)})$.

A cadeia se aproxima de sua distribuição de equilíbrio conforme o número de iterações aumenta, independentemente de seu valor original. Assume-se que a convergência é atingida na iteração em que a distribuição se aproxima da distribuição de equilíbrio $p(\theta | y)$.

Segundo Kruschke (2015), as vantagens do amostrador de Gibbs sobre o algoritmo de Metropolis-Hastings são que não há necessidade de ajustar uma distribuição proposta, não há ineficiência ou rejeição de movimentos propostos.

Porém, existe a restrição de ter que se obter probabilidades condicionais para cada parâmetro em relação aos demais parâmetros e gerar amostras aleatórias dessas distribuições de probabilidades condicionais. A desvantagem citada pelo autor referente ao amostrador de Gibbs é que ao mudar somente um valor do parâmetro por vez, o seu progresso pode ser parado por parâmetros altamente correlacionados.

Uma descrição mais detalhada do método pode ser encontrada em Gamerman e Lopes (2006) e Casella e George (1992).

3.2.2 Análise da Convergência do MCMC

Segundo Kruschke (2015), existem três objetivos principais a serem alcançados ao se gerar uma amostra MCMC de uma distribuição a posteriori. São eles:

1. Os valores da cadeia têm que ser representativos da distribuição a posteriori. Eles não podem ser influenciados pelo valor arbitrário inicial configurado para começar a cadeia e eles devem explorar todo o espaço paramétrico da distribuição a posteriori, sem ficar preso em alguma região localizada.
2. A cadeia deve ter um tamanho suficiente para realizar a estimativa com precisão e estabilidade. As estimativas, principalmente de tendência central e limites de intervalos de confiabilidade, não devem divergir muito caso as simulações sejam geradas novamente.
3. A cadeia deve ser gerada de forma eficiente. Ou seja, com o menor número possível de passos, para não exigir muito esforço computacional.

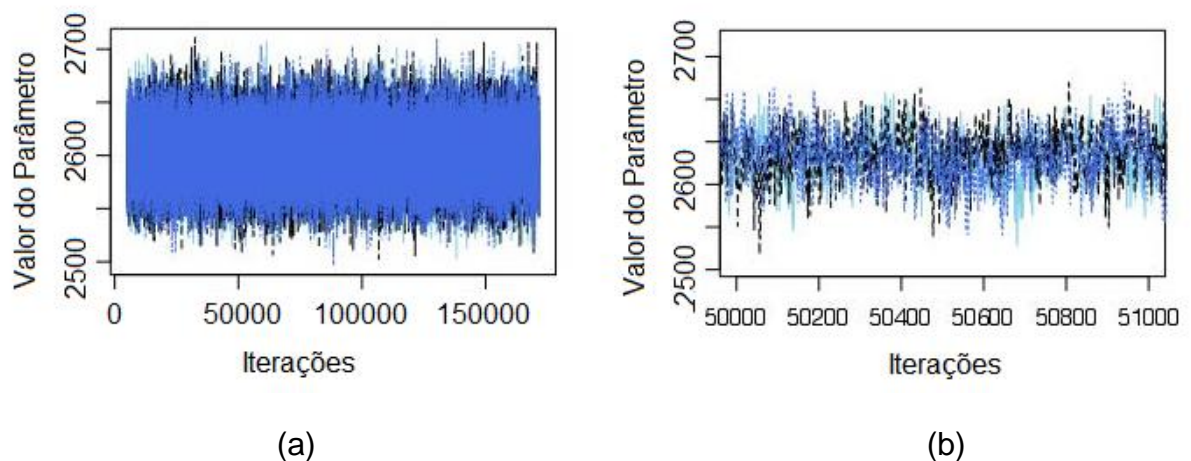
Para verificar se estes objetivos são atendidos, podem ser utilizados os métodos propostos por Kruschke (2015). Esses métodos são expostos a seguir.

3.2.2.1 Representatividade do MCMC

Para analisar a representatividade da cadeia, é necessário procurar por alguma influência de valores iniciais e por cadeias chamadas cadeias órfãs, ou seja, que tenham se estabelecido em regiões não usuais do espaço paramétrico. A análise pode ser feita de forma gráfica, verificando a trajetória da cadeia, ou de forma numérica.

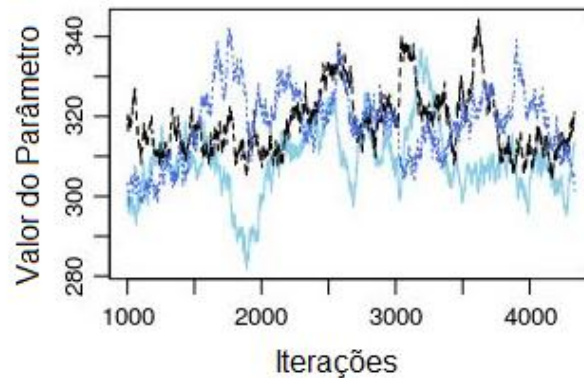
Uma representação gráfica utilizada na verificação das cadeias é o chamado *Trace plot*. Para construir esse gráfico, é necessário gerar duas ou mais cadeias e sobrepor-las. Se todas elas forem representativas da distribuição a posteriori, elas devem se apresentar sobrepostas umas nas outras. Quando todas as iterações são contempladas graficamente, a figura 17 (a) mostra como ficaria um exemplo de possível convergência das cadeias geradas, contudo, como a sobreposição apresentada não detalha o comportamento de cada cadeia, a figura 17 (b) ilustra somente algumas iterações das cadeias geradas, sendo possível visualizar de forma mais clara a sobreposição que ocorre entre as cadeias. Quando não há suspeita de não convergência das cadeias o comportamento do *trace plot* se assemelha ao apresentado na figura 18.

FIGURA 17 – GRÁFICO DE DIAGNÓSTICO TRACE PLOT. (a) TRACE PLOT TODAS AS ITERAÇÕES (b) TRACE PLOT EXPANDIDO.



FONTE: O autor

FIGURA 18 – GRÁFICO DE DIAGNÓSTICO *TRACE PLOT* QUANDO NÃO HÁ INDICATIVO DE CONVERGÊNCIA.



FONTE: O autor

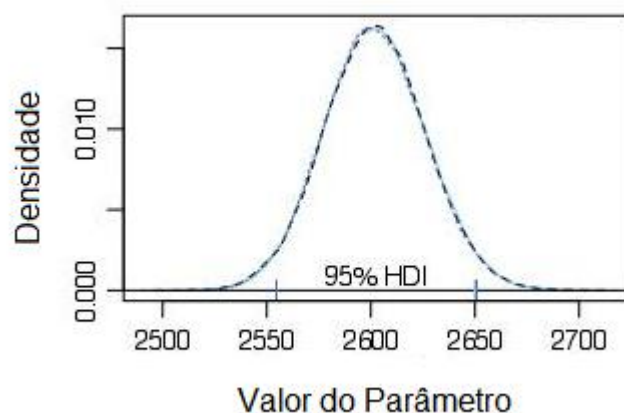
Normalmente, são necessários centenas de passos da cadeia para que elas convirjam para a mesma região do parâmetro. Os primeiros passos da cadeia, quando ela se move de seu valor inicial para a região modal a posteriori, ou seja, a região em que alcança o seu espaço paramétrico, é chamado de período de aquecimento, ou *burn-in*. Esses passos iniciais devem ser desconsiderados por não ainda serem representativos. Em aplicações reais centenas de passos são aplicados como período de *burn-in*.

O *Trace plot* permite analisar o comportamento das cadeias. Para indicação de convergência, as cadeias devem se misturar bem umas com as outras. No entanto, caso elas estejam presas em uma parte não representativa do espaço paramétrico, mesmo que sobrepostas, isto é uma indicação de não convergência. Deve-se estar atento a alguma cadeia isolada, ou presa a um mesmo valor durante muito tempo, ou em uma variação muito gradual, pois estes são sinais de não convergência.

Outro gráfico que permite uma representação visual da representatividade é o chamado *Density plot*, ilustrado na figura 19. Este gráfico faz a média através da sobreposição de intervalos, para produzir uma suave representação da densidade de probabilidade. Ao gerar o gráfico de duas ou mais cadeias, estas devem se sobrepor depois do período de *burn-in*, como indicativo de que elas produzem valores representativos da distribuição a posteriori.

Os gráficos gerados também mostram o intervalo HDI de 95%, que, para as diferentes cadeias, devem ter valores levemente diferentes, já que são amostras finitas da distribuição a posteriori. Para cadeias infinitas, os valores estimados das cadeias convergem todos, no limite, para o mesmo valor. Contudo, na prática, é possível somente a geração cadeias finitas. Através do *Density plot*, consegue-se ter uma impressão visual da variabilidade das estimativas.

FIGURA 19 – GRÁFICO DE DIAGNÓSTICO *DENSITY PLOT*.



FONTE: O autor.

Uma das estimativas numéricas propostas para se verificar a representatividade é a chamada estatística de Gelman-Rubin (GELMAN e RUBIN, 1992) ou estatística de Brooks-Gelman-Rubin (BROOKS e GELMAN, 1998), ou ainda fator de redução de escala potencial. Este fator pode ser interpretado como um fator de diagnóstico da convergência. Este método tem como premissa verificar a variância existente entre as cadeias geradas em relação a variância de cada cadeia. Portanto, se todas as cadeias estão estabelecidas em uma amostra representativa, a diferença média entre as cadeias deve ser a mesma que a diferença média dentro das cadeias.

Para calcular o fator de redução de escala potencial, é necessário simular duas ou mais cadeias m de tamanho $2n$ e descartar o período de *burn-in*. A seguir, deve-se calcular a variância dentro da cadeia e entre as cadeias. A variância de um parâmetro é calculada como uma soma ponderada da variância dentro da cadeia e entre as cadeias. A variância dentro da cadeia é dada por

$$W = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m s_j^2 \quad (74)$$

onde m é o número de cadeias geradas, enquanto s_j é dado por

$$s_j^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\theta_{ij} - \bar{\theta}_j)^2 \quad (75)$$

A estimativa s_j é a fórmula para variância na j -ésima cadeia, ao passo que W é a média das variâncias de cada cadeia. Ela muitas vezes subestima a verdadeira variância da distribuição estacionária, já que as cadeias provavelmente não alcançaram todos os pontos da distribuição estacionária.

Já a variância entre as cadeias é obtida de

$$V = \frac{n}{m-1} \sum_{j=1}^m (\bar{\theta}_j - \tilde{\theta})^2 \quad (76)$$

onde $\tilde{\theta}$ é dado por

$$\tilde{\theta} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \bar{\theta}_j \quad (77)$$

Esta é a variância das médias das cadeias multiplicada por n , uma vez que cada cadeia é baseada em n sorteios.

A variância da distribuição estacionária pode, então, ser estimada como uma média ponderada entre W e V da seguinte forma:

$$\text{Var}(\theta) = \left(1 - \frac{1}{n}\right) W + \frac{1}{n} V \quad (78)$$

Com o valor obtido em (78), calcula-se finalmente estatística Gelman-Rubin, ou fator de redução de escala potencial, através de

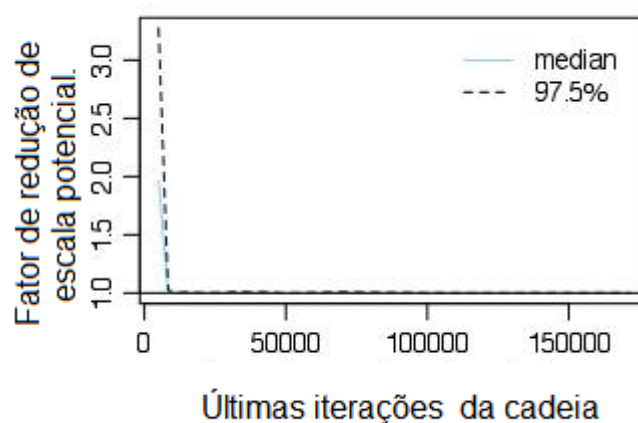
$$\hat{R} = \sqrt{\frac{\text{Var}(\theta)}{W}} \quad (79)$$

onde \hat{R} é a estatística do teste, ou seja, o fator de redução de escala potencial. Esta estatística deve ser calculada para cada parâmetro no modelo.

O gráfico referente a estatística Gelman-Rubin, ilustrado na figura 20, apresenta a mediana e o percentil de 97,5% indicando a confiabilidade. Quando uma ou mais cadeias estão isoladas, ou presas fora do espaço paramétrico da distribuição a posteriori, a variância entre as cadeias irá crescer em relação a variância dentro das cadeias. A convergência aproximada é diagnosticada quando o limite superior é próximo a 1. Se o valor da estatística for maior que 1,1 é um indicativo de não convergência (GELMAN e RUBIN, 1992; KRUSCHKE, 2015).

Para uma análise mais detalhada e definição formal do teste, recomenda-se Gelman e Rubin (1992) e Brooks e Gelman (1998).

FIGURA 20 – GRÁFICO DA ESTATÍSTICA GELMAN-RUBIN.



FONTE: O autor.

3.2.2.2 Precisão do MCMC

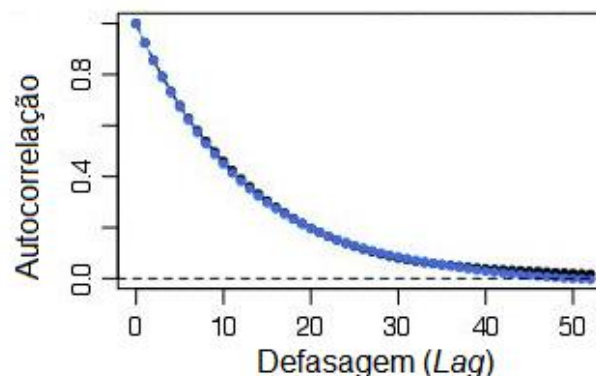
Ainda no tocante à convergência do MCMC, deve-se analisar a precisão da cadeia. Ou seja, é necessário gerar uma amostra de tamanho suficiente para obter estimativas numéricas estáveis e precisas da distribuição a posteriori.

Cada passo na cadeia deve fornecer informação independente sobre a distribuição do parâmetro. No entanto, quando é gerada uma cadeia muito agrupada, os sucessivos passos dados dentro da cadeia podem não trazer informações independentes. Por isto, é necessário medir o agrupamento da cadeia. Quanto menos agrupada ela for, mais precisa é a informação gerada.

A medida utilizada no presente trabalho é a medida de autocorrelação. A autocorrelação é computada sobrepondo uma cadeia com ela mesma, só que um determinado número k de passos adiante. O número de passos entre a cadeia original e sua cópia sobreposta é a defasagem, ou *lag*. A autocorrelação em um *lag* k é denotada pela função de autocorrelação de k , $ACF(k)$.

Quando se observa graficamente que a cadeia é muito correlacionada, os valores da cadeia, em sucessivos passos, não estão fornecendo informações independentes sobre a distribuição a posteriori, posto que cada passo sucessivo é parcialmente redundante com o passo anterior. Por consequência, estas cadeias demoram muitos passos para gerarem informação independente sobre a distribuição a posteriori. Um exemplo do gráfico de autocorrelação é ilustrado na figura 21.

FIGURA 21 – GRÁFICO DE AUTOCORRELAÇÃO DAS CADEIAS.



FONTE: O autor.

Uma forma de melhorar a autocorrelação é utilizar o método denominado *thinning* da cadeia. Configura-se a cadeia para armazenar na memória os valores a cada k passos. Por exemplo, configura-se um *thinning* igual a 10 passos, de modo que apenas os passos 1, 11, 21, 31, 41 serão armazenados e assim sucessivamente. Resulta, então, uma cadeia com uma menor autocorrelação do que a da cadeia original completa.

Contudo, essa nova cadeia contém menos informação que a cadeia original, e estimar a partir dela é, na média, menos estável e preciso que uma cadeia original (Link e Eaton, 2012), posto que, nesta, cada passo fornece uma nova informação. A aplicação do *thinning* envolve o mesmo número de passos da cadeia original, a diferença é que devido ao processo em questão não é armazenado na memória a mesma quantidade de dados, portanto, não existe economia de tempo durante o processo de geração de dados. Por este motivo, além de reduzir a autocorrelação, o método é útil no caso de a cadeia original exigir muita memória computacional.

3.2.2.3 Eficiência do MCMC

A eficiência é o terceiro objetivo a ser alcançado ao se usar o MCMC. Algumas formas de melhorar a eficiência do MCMC são citadas por Kruschke (2015), como, por exemplo, utilizar processadores em paralelo. Caso se esteja utilizando um computador com mais de um processador, é possível gerar as cadeias simultaneamente nos diferentes processadores. Mudar a parametrização do modelo de acordo com a conveniência computacional também é uma outra forma de se buscar eficiência.

Para melhor análise dos métodos de convergência, indica-se Cowles e Carlin (1996), onde foi realizado um estudo comparativo dos vários métodos disponíveis para MCMC, empregando diversos métodos, quantitativos e qualitativos. Nesse estudo, não se chegou a uma conclusão cabal sobre qual método é o mais eficiente.

3.3 COMPORTAMENTO MECÂNICO

A estimação de propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos através de modelos estatísticos tem sido utilizada de modo a associar, de forma consistente, dados experimentais e modelos matemáticos. Segundo Gogu et al (2010), um método muito difundido para identificação de constantes elásticas, a partir de experimentos, é o método de mínimos quadrados. Porém, ainda conforme esses autores, ao se comparar este método com abordagem de inferência bayesiana, pode-se concluir que a inferência bayesiana chega a resultados mais valiosos. Isso se deve ao fato de que a inferência bayesiana é uma abordagem estatística que fornece, como resposta, distribuições de probabilidade para cada parâmetro de interesse, pois considera cada um deles como uma variável aleatória. Já o método de mínimos quadrados fornece, tipicamente, um número determinístico para cada parâmetro.

Vários trabalhos têm sido realizados de modo a identificar propriedades elásticas em modelos dinâmicos utilizando a abordagem Bayesiana. Lai e Ip (1996) aplicaram a inferência Bayesiana na estimação de parâmetros de propriedades elásticas de uma placa compósita em vibração, utilizando como informação os modos naturais da placa. A estimação bayesiana foi aplicada nos parâmetros com base nas diferenças entre as respostas analíticas e experimentais, levando em consideração a confiança associada ao modelo matemático e ao parâmetro estimado. Considerou-se o método como uma alternativa para encontrar os vários módulos elásticos de uma placa compósita.

Daghia et al (2007) investigaram a estimação das constantes elásticas de placas laminadas grossas. O objetivo era examinar e comparar dois estimadores de identificação de constantes elásticas para essas placas. Um dos métodos utilizou uma técnica numérico-experimental, que tinha por objetivo minimizar uma função objetivo não linear, que envolvia a diferença entre os dados observados e as frequências obtidas pela via numérica. O outro método foi o método de estimação bayesiana. Um teste modal simples foi aplicado e somente valores das frequências naturais foram levados em conta. O estimador bayesiano se mostrou mais eficiente e robusto.

Rebba et al (2006) desenvolveram uma metodologia bayesiana para avaliar o ajuste de modelos computacionais de simulação de experimentos, comparando o resultado do modelo com os dados observados, que os autores chamam de verificação e validação. Foram utilizadas duas metodologias. No primeiro caso, executou-se um modelo de avaliação utilizando um critério de aprovação - reprovação, utilizando o fator de Bayes como medida de decisão entre os modelos. No segundo caso, incluiu-se a incerteza nos dados experimentais e estimou-se o fator de Bayes utilizando as distribuições a priori e a posteriori de saída dos modelos.

Uma abordagem bayesiana para identificar o módulo complexo de Young de um sólido viscoelástico no domínio da frequência, a partir de dados experimentais de propagação de ondas, foi desenvolvida por Mahata e Söderström (2007). Esses autores recordam que, dependendo da forma como os dados são processados no domínio da frequência, os métodos de estimação tradicionais podem ser classificados em duas categorias, não paramétrica e paramétrica. A abordagem mais comum é a identificação não paramétrica, onde os parâmetros do material são estimados separadamente para cada frequência. Como resultado, uma estimativa do módulo complexo para uma determinada frequência é independente da estimativa para as outras frequências. A principal desvantagem desse método é não poder explorar o fato de que o módulo complexo é uma função contínua da frequência.

Os autores em tela propuseram uma abordagem paramétrica baseada na inferência bayesiana, motivados pelo fato de que o módulo complexo é uma função contínua da frequência (vide capítulo 2). No valor do módulo complexo, em uma frequência particular, há uma quantidade significativa de informações sobre o valor do módulo complexo na frequência vizinha, fornecendo uma estimativa anterior do mesmo. Esta estimativa a priori pode ser atualizada usando a medição no próximo estágio. Como conclusão, os autores consideraram que a abordagem bayesiana forneceu estimativas mais consistentes com relação às frequências medidas.

Zhang et al. (2013) utilizaram a inferência bayesiana para identificar, ao longo da frequência, o módulo de elasticidade, de um material viscoelástico, inserido em uma estrutura laminada. O modelo utilizado para identificação das propriedades materiais foi o de derivadas fracionárias com cinco parâmetros. A identificação do módulo de elasticidade foi baseada em dados experimentais e em um modelo de

elementos finitos, cuja eficiência estava sujeita a um modelo substituto de redes neurais, combinado a um amostrador de Monte Carlo via Cadeias de Markov. Neste trabalho, a principal vantagem da aplicação do método bayesiano residiu em sua habilidade de retornar a incerteza a posteriori, quantificada em termos da função densidade de probabilidade.

Oates et al. (2013) quantificaram a incerteza de um modelo viscoelástico através da validação da taxa de deformação de um elastômero dielétrico em deformação finita. As densidades de probabilidades obtidas através do método bayesiano foram utilizadas para formular um modelo refinado, que incorporou as densidades de probabilidade diretamente dentro do modelo, através de métodos de homogeneização. Os autores se concentraram na incerteza do aspecto viscoelástico do modelo, para demonstrar sob quais regimes a estrutura de homogeneização estocástica fornecia melhorias na previsão do comportamento constitutivo viscoelástico.

Segundo Nagel e Sudret (2013), a utilização da inferência bayesiana quantifica a incerteza do modelo e permite a estimativa dos parâmetros do modelo em uma grande variedade de situações experimentais. Eles afirmam ainda que um grande trunfo do paradigma bayesiano é o seu tratamento único e consistente de modelos complexos.

Gogu et al. (2013) utilizaram a abordagem bayesiana para identificar quatro constantes elásticas de um material compósito, com base em um teste de tração, em que foram medidos os campos de deslocamento associados. Um dos desafios citados pelos autores para identificação das várias propriedades do material era lidar com as diferentes fontes de incerteza no experimento e a sua modelagem, de modo a estimar a incerteza resultante das propriedades identificadas. Por isto, foi considerado o uso da metodologia bayesiana, que não identificou somente um valor para cada uma das quatro constantes elásticas, mas sim funções distribuição de probabilidade das propriedades. Dessa forma, foi possível avaliar as incertezas provenientes das amostras, do experimento e da modelagem numérica.

Hernandez et al (2015) utilizaram a inferência bayesiana para caracterizar os parâmetros de um modelo derivada de ordem fracionária com cinco parâmetros. Os autores consideraram um ensaio experimental de um material viscoelástico em cisalhamento, porém, com variação somente em frequência, mantendo a

temperatura constante. Os autores aproximaram as incertezas dos parâmetros do modelo a uma distribuição normal multivariada. Não houve apresentação da qualidade e da representatividade dos resultados obtidos.

A abordagem bayesiana é também utilizada como um método de atualização de modelos, ou seja, havendo resultados experimentais de estruturas físicas, é possível atualizar o modelo teórico correspondente já disponível com os dados dos resultados experimentais. Dessa forma, ao ser feito o processo de atualização, o novo modelo será mais confiável para futuras previsões. Existe uma ampla gama de trabalhos realizados nesse sentido.

Segundo Beck e Katafygiotis (1998), a necessidade de atualização de um modelo teórico de uma estrutura surge porque sempre existem erros associados com o seu processo de elaboração, o que leva a uma incerteza na previsão. Existem várias fontes de erros de modelagem, como variações das propriedades do material durante a fabricação, imprecisão na modelagem do comportamento constitutivo do material e imprecisão da modelagem das condições de contorno. Devido a estes erros, a atualização de modelo deve ser tratada com inferência estatística. Uma importante vantagem de se utilizar a inferência bayesiana nessa questão é que ela pode ser utilizada para desenvolver métodos capazes de lidar com a relativa insuficiência de dados.

Hongxing et al (2000) utilizaram o estimador bayesiano para atualização de um modelo de elementos finitos. Eles comentam que os modelos de elementos finitos podem contar, em geral, incertezas e erros, principalmente quando estruturas complexas são modeladas. Nesses casos o estimador bayesiano melhora, segundo os autores, a estabilidade numérica e robustez do modelo atualizado a partir de comparação com resultados computacionais com os resultados medidos em estruturas reais.

Alvin (1997) também utilizou a estimação bayesiana para atualizar parâmetros de um modelo de elementos finitos, empregando ainda a minimização de resíduos de um modelo do sistema dinâmico estudado. Já Beck e Au (2002) aplicaram a atualização bayesiana em modelos estruturais, utilizando simulações de Monte Carlo via Cadeias de Markov.

Cheung e Beck (2009) utilizaram a inferência bayesiana para atualização de modelo via simulações híbridas de Monte Carlo, com aplicações para modelos

dinâmicos estruturais e vários parâmetros de incerteza. O modelo bayesiano foi capaz de caracterizar as incertezas do modelo associadas com o sistema estrutural e forneceu uma estimação robusta, mesmo quando a classe de modelo foi não identificável a partir da resposta registrada.

Katafygiotis e Yuen (2001) apresentaram um estudo sobre o problema de identificação dos parâmetros modais de um modelo estrutural, utilizando dados ambientais de resposta no domínio do tempo. Neste estudo, foi apresentada a abordagem bayesiana de densidade espectral para atualização modal, que utiliza as propriedades estatísticas de um estimador de densidade espectral para obter valores ótimos dos parâmetros modais atualizados. São também obtidas as incertezas associadas, ao se calcular a distribuição de probabilidade conjunta a posteriori dos parâmetros de interesse.

Esta abordagem de densidade espectral foi estendida de sistemas lineares para um sistema não linear por Yuen e Beck (2003), que atualizaram as propriedades de um sistema dinâmico com incertezas na entrada. Um modelo estocástico foi utilizado para a incerteza de entrada e a abordagem probabilística bayesiana foi empregada para quantificar as incertezas nos parâmetros dos modelos. Esta abordagem forneceu, além da estimativa ótima dos parâmetros, as plausibilidades relativas de todos os valores dos parâmetros, com base nos dados.

Kerschen et al. (2003) desenvolveram um modelo bayesiano para identificação de uma estrutura mecânica não linear, em uma base de isolador mecânico. O modelo proposto se baseou em um algoritmo de inferência bayesiana para fornecer o conhecimento das não linearidades. Uma família de modelos não paramétricos foi definida para representar as respostas não lineares do sistema e o algoritmo selecionado estimou a verossimilhança de que cada membro era apropriado. O método, segundo os autores, se mostrou uma ferramenta importante para a dinâmica estrutural.

Zhang et al. (2011) também utilizaram a abordagem bayesiana para atualização de modelo estrutural e quantificação de erros de diferentes tipos, incluindo erros de medida, distorções não lineares decorrentes da linearização do modelo e erros de modelagem devido à previsibilidade limitada do mesmo. A atualização do modelo foi investigada considerando todos os parâmetros pertinentes como sendo variáveis aleatórias. Reforçou-se que a principal vantagem da

abordagem é retornar funções densidade de probabilidade conjunta ou marginal das quantidades atualizadas de interesse.

Marwala et al. (2005) compararam o método de máxima verossimilhança com o método bayesiano para atualização de um modelo de elementos finitos. O método de máxima verossimilhança foi implementado utilizando algoritmos genéticos, enquanto que o método bayesiano recorreu a simulações de Monte Carlo via Cadeias de Markov. Como objeto de estudo, foi utilizada uma viga engastada livre, sendo ainda consideradas as propriedades dos modos de vibrar. A atualização através do método bayesiano forneceu uma previsão mais precisa das propriedades modais em comparação com a atualização feita por máxima verossimilhança. Os dois métodos exigiram os mesmos esforços computacionais.

De modo geral, observa-se que as metodologias bayesianas são flexíveis, permitindo incorporação de múltiplos níveis de incerteza e possibilitando a combinação de informações de diferentes origens. Como destacada vantagem a abordagem combina diferentes tipos de informação e lida com as incertezas utilizando ferramentas probabilísticas.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

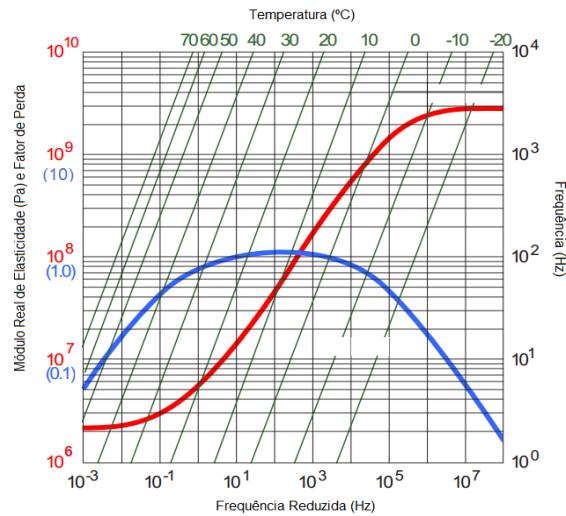
Conforme exposto anteriormente, o objetivo do presente estudo é modelar probabilisticamente as propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos através da abordagem de inferência bayesiana, com vistas ao uso desses materiais no controle de vibrações. Para tanto, os dados experimentais utilizados foram retirados de trabalho um anterior, qual seja Balbino (2012). Os materiais e métodos empregados são descritos a seguir.

4.1 MATERIAL VISCOELÁSTICO

No experimento ora considerado, foi utilizado um material viscoelástico conhecido e típico, estudado em Jones, 1992 e Lopes, 1998. O material é fabricado e comercializado pela *E-A-R Specialty Composites* (Indianápolis, EUA) e seu nome comercial é ISODAMP C-1002. Trata-se de um elastômero a base de cloreto de polivinila (DANDEKAR et al, 1991; SZABO e KEOUGH, 2002). Não se tem informação sobre a data de fabricação das mantas material de onde foram retiradas as amostras correspondentes.

Este é um material utilizado em isolamento e controle de impacto em equipamentos de laboratório e escritórios, computadores e periféricos, telecomunicações e eletrônicos, equipamentos industriais e automóveis.

A figura 22 apresenta o nomograma de frequência reduzida do material, nomograma esse disponibilizado pelo fabricante nas informações de apresentação e divulgação do produto.

FIGURA 22 – NOMOGRAMA DO MATERIAL ISODAMP C-1002

FONTE: EAR, 1996

4.2 EQUIPAMENTO DE AQUISIÇÃO DE DADOS

Para adquirir os dados de propriedades dinâmicas do EAR C-1002, foi utilizado um equipamento da marca NETZSCH modelo “DMA 242C” (DMA – Dynamic Mechanical Analysis), ilustrado na figura 23. Os ensaios foram feitos com as amostras sob tração, sendo a montagem experimental associada mostrada na figura 24. O equipamento empregado permite ainda a execução de ensaios de flexão em três pontos, flexão em *cantilever*, flexão em *dual cantilever*, cisalhamento e compressão. Selecionou-se o ensaio de tração em função das características e da faixa de variação estimada das propriedades dinâmicas do material investigado, como, aliás, recomendado no próprio manual do equipamento.

A figura 25 apresenta os componentes associados à região em que ocorrem os ensaios no equipamento. Observam-se, nessa figura, que há um oscilador, que se move numa dada frequência, em relação ao porta-amostra. Dele, há sensores de força e deslocamento. No ensaio de tração, esses sensores permitem a determinação do módulo complexo de elasticidade \bar{E} pela seguinte expressão

$$\bar{E} = \frac{\text{força}}{\text{deslocamento}} * \frac{\text{comprimento da amostra}}{\text{seção transversal da amostra}} \quad (80)$$

A razão apresentada na equação (80) resulta complexa pelo fato dos sinais de força e deslocamento possuírem fases distintas. O programa computacional utilizado pelo equipamento, de posse da razão medida entre a força e deslocamento e das informações de comprimento e seção transversal da amostra (que são fornecidos pelo usuário) fornece os módulos de elasticidade real e imaginário e também o fator de perda, a partir da equação (85).

Na realização do ensaio em tração, informa-se a amplitude desejada para a força dinâmica que atua na amostra. Informa-se ainda o valor da força estática associada que impede o deslocamento livre da amostra, quando a força dinâmica é aplicada (SILVA et al, 2006). Salienta-se que as amostras são deformadas na faixa linear de comportamento.

A frequência na qual as propriedades dinâmicas são obtidas decorre da ação do oscilador mostrado na figura 25. Já a temperatura é controlada pela inserção da amostra numa câmara apropriada. Essa câmara pode ser visualizada tanto na figura 23 quanto na figura 25.

FIGURA 23 – EQUIPAMENTO NETZSCH DMA 242C



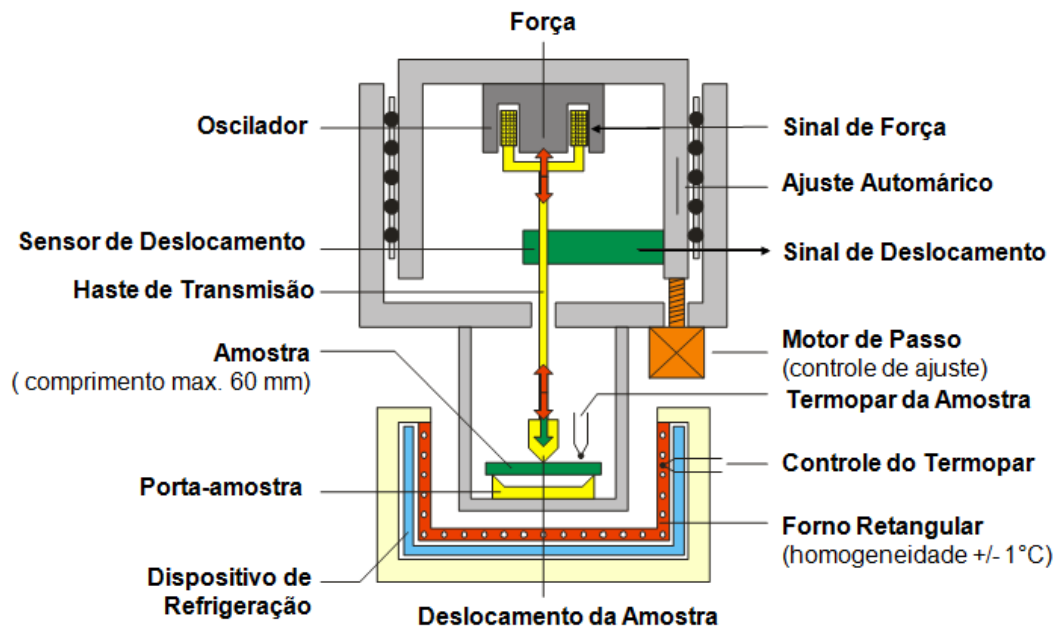
FONTE: Netzsch, 1994

FIGURA 24 – PORTA AMOSTRA DO ENSAIO DE TRAÇÃO DO NETZSCH DMA 242C



FONTE: Netzsch, 1994

FIGURA 25 – COMPONENTES DA REGIÃO DE ENSAIO DO NETZSCH DMA 242C



FONTE: Netzsch, 1994

4.3 EXPERIMENTOS

Como exposto em Balbino (2012), o tamanho de amostra foi determinado de acordo com os princípios da inferência clássica, posto que aquele trabalho utilizou esta metodologia. O tamanho de amostra disponível foi de 25 unidades amostrais do E-A-R ISODAMP C-1002 e respectivos resultados de módulo real de elasticidade e módulo imaginário de elasticidade.

As dimensões amostras foram as seguintes: 10 mm de comprimento, 4 mm de largura e 1,37 mm de espessura. Destas, apenas o comprimento é fixado no manual do equipamento. As demais decorrem das limitações do porta-amostra e das

mantas de material disponíveis para extração das amostras. O valor da força estática aplicada foi de 1 N, enquanto a amplitude da força dinâmica foi de 0,8 N.

O equipamento NETZSCH DMA 242C possui uma faixa de frequências fixa, na qual as frequências variam de 0,1 a 100 Hz. Com base em estudos anteriores (JONES, 1992; LOPES, 1998; ESPÍNDOLA et al, 2005) e na faixa de frequências disponíveis, decidiu-se ensaiar o material em 10 frequências consideradas representativas para ampla caracterização do material. Foram elas: 0,1 Hz, 0,2 Hz, 0,5 Hz, 1 Hz, 2 Hz, 5 Hz, 10 Hz, 20 Hz, 50 Hz e 100 Hz.

As temperaturas foram selecionadas de modo a se obter uma caracterização dinâmica ampla do material, baseado no conhecimento prévio estabelecido pelo nomograma do fabricante e trabalhos anteriores, para mais detalhes ver Balbino (2012). Essas temperaturas, num total de 7, foram: -40°C, -20°C, -10°C, 0°C, 10°C, 20°C e 50°C.

O ensaio foi conduzido deixando a câmara térmica durante 30 minutos na temperatura de interesse, para estabilização das propriedades do material naquela temperatura. Logo a seguir, foram coletados os dados em cada frequência de ensaio. Portanto, cada unidade experimental (amostra) foi ensaiada em todas as temperaturas e frequências escolhidas para a realização do experimento. O ensaio de cada unidade experimental foi conduzido ao longo de um mesmo dia, sem interrupção, para redução de possíveis incertezas.

No momento da realização dos ensaios, o programa computacional utilizado no DMA 242C permitia programar, em uma dada temperatura, as frequências de interesse. Porém, para se prosseguir para a próxima temperatura de ensaio, era necessário reiniciar a programação, uma vez que esta possuía tal limitação em temperatura. O ensaio realizado para obtenção dos dados no trabalho de Balbino (2012) é consagrado na literatura e não se pretende propor outro ensaio alternativo de coleta de dados para comprar os resultados obtidos.

4.4 PROGRAMAS COMPUTACIONAIS

Para análise estatística dos dados experimentais, foi empregado o programa computacional R. O R é um programa livre de manipulação de dados, realização de cálculos e confecção de gráficos estatísticos. Ele disponibiliza todas as informações

necessárias e pode ser obtido a partir do endereço eletrônico <http://www.r-project.org/>.

A implementação da inferência bayesiana foi feita através do programa JAGS (*Just Another Gibbs Sampler*), que também é um programa de livre acesso e plataforma, e pode ser obtido através do endereço eletrônico <http://sourceforge.net/projects/mcmc-jags>. O JAGS é um programa de análise de modelos bayesianos que utiliza métodos de simulações de Monte Carlo via Cadeias de Markov. Um manual com informações adicionais sobre o programa ser encontrado no endereço eletrônico http://www.stats.ox.ac.uk/~nicholls/MScMCMC15/jags_user_manual.pdf.

O programa R possui uma interface para comunicação com o programa JAGS, implementada através dos pacotes *rjags* (PLUMMER, 2014) e *R2jags* (SU e YAJIMA, 2012).

O programa computacional desenvolvido para análise do modelo bayesiano com equação de Arrhenius é exposto no Apêndice A. Um programa análogo foi desenvolvido para o caso da equação WLF.

4.5 MODELO BAYESIANO

4.5.1 Verossimilhança

Especificamente no tocante à análise bayesiana, foi implementado o modelo apresentado na sessão 3.1.3. A função de verossimilhança proposta foi uma distribuição normal, obtida a partir da suposição de que os erros, associados a valores estimados por uma função $f(\cdot)$, são independentes e normalmente distribuídos. A função $f(\cdot)$ apresenta como argumentos os valores de temperatura e frequência que foram os fatores de variação utilizados no experimento, e o vetor Θ de parâmetros a serem estimados.

Assim,

$$Y = f(\text{temperatura}, \text{frequência}, \Theta) + \varepsilon \quad (81)$$

onde $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$.

Na equação (81), a função $f(\cdot)$ representa a formulação para o módulo complexo de elasticidade, sendo Y a variável resposta. O vetor Θ é composto pelos parâmetros relacionados às propriedades viscoelásticas, segundo a equação (28). Conforme a escolha da equação para estimar o fator de deslocamento utilizou-se um conjunto específico de parâmetros, sendo $\Theta = \{E_L, E_H, b_0, \beta, \theta_1, \theta_2\}$ quando o fator de deslocamento vinha da equação WLF e $\Theta = \{E_L, E_H, b_0, \beta, T_A\}$ quando o fator de deslocamento vinha da equação de Arrhenius.

4.5.2 Distribuições a Priori

As distribuições a priori foram determinadas através do conhecimento prévio dos parâmetros a serem estimados através dos estudos em Jones (1992) e Lopes (1998) e mesmo do nomograma fornecido pelo fabricante. Foram determinadas, de forma univariada, distribuições a priori para sete parâmetros, quais sejam, $E_L, E_H, b_0, \beta, \theta_1, \theta_2$ e T_A .

Quanto aos parâmetros relacionados ao modelo de derivada ordem fracionária do material viscoelástico em estudo, EAR C-1002, há informações prévias a respeito de seu comportamento, que podem ser encontradas, por exemplo, em Jones (1992) e Lopes (1998). Estas informações permitiram a identificação de valores iniciais para os parâmetros em estudo, valores esses que foram utilizados como tendência central das distribuições a priori. Entretanto, nenhuma incerteza sobre estes valores pode ser determinada a partir daqueles estudos. A princípio, foi adotada uma variância alta em torno dos parâmetros, para que a influência da escolha da priori não fosse significativa ao se estimar a distribuição a posteriori.

No caso dos parâmetros referentes ao fator de deslocamento dado pela equação WLF, quais sejam, θ_1 e θ_2 , a variância proposta não foi de alta magnitude, posto que nada foi encontrado na literatura que desabonasse esse procedimento. Estes dois parâmetros são altamente correlacionados entre si, fato que foi empiricamente verificado após várias simulações feitas com o modelo e correspondentes análises dos diagnósticos de convergência. Já o parâmetro dado

pela equação de Arrhenius foi estimado aplicando a ele uma variância de mesma magnitude dos demais parâmetros.

Os parâmetros têm como restrições os seus espaços paramétricos. Essas restrições devem ser respeitadas ao serem escolhidas distribuições de probabilidade a priori, com seus respectivos hiperparâmetros, para que os resultados sejam consistentes. No caso, as restrições são dadas por $E_H, E_L, b_0, T_A, \theta_1, \theta_2 \in (0, \infty)$ e $\beta \in (0, 1)$.

Fez-se uma análise considerando várias potenciais distribuições a priori para cada parâmetro, com os respectivos valores iniciais para os hiperparâmetros. Foram, então, escolhidas algumas distribuições a priori plausíveis para cada parâmetro, com valores de hiperparâmetros que fossem adequados ao conhecimento prévio. Trabalhos anteriores que lidaram com parâmetros elásticos, tais como Gogu (2010) e Zhang (2013), foram também tomados como base.

Para os parâmetros $E_H, E_L, b_0, T_A, \theta_1$ e θ_2 considerou-se inicialmente uma distribuição a priori gama, que contempla o espaço paramétrico de interesse. Foram inseridos os valores de tendência central e variância, além dos valores iniciais, que é uma exigência do algoritmo MCMC. A análise bayesiana foi conduzida para as diferentes tentativas, com as consequentes análises dos gráficos de diagnóstico de convergência, para verificar se as cadeias geradas pelo MCMC chegavam satisfatoriamente a distribuição a posteriori.

As tentativas com a distribuição gama não se mostraram satisfatórias, posto que as cadeias não alcançaram a convergência adequada. No entanto, não houve variação significativa nas estimativas. Tentativas de utilizar a distribuição beta também foram conduzidas, sem que se obtivessem melhorias nos resultados.

Observa-se que os parâmetros envolvidos possuem ordens de grandeza bastante diferentes, além de e restrições adicionais que devem ser levadas em conta na escolha das distribuições a priori (MEDEIROS JUNIOR, 2010). Como o parâmetro E_L é sempre bem menor que o parâmetro E_H , optou-se por uma distribuição a priori do tipo normal truncada para E_L , de modo a atender a restrição em tela. Já o parâmetro E_H não teve nenhuma restrição adicional a ser considerada para se utilizar a distribuição normal.

O parâmetro b_0 assume valores sempre positivos e muito pequenos, portanto, a distribuição log normal foi entendida como adequada para ser distribuição a priori correspondente. Para o parâmetro β , testou-se uma distribuição uniforme no intervalo $[0,1]$, o resultado foi satisfatório, contudo, essa distribuição pressupõe que a probabilidade dos valores é a mesma em todo o intervalo, o que, na prática não se observa para esse parâmetro. Sendo assim, a opção foi pela distribuição normal truncada no intervalo $[0,1]$.

Os parâmetros θ_1 e θ_2 também obtiveram melhores estimativas ao utilizar a distribuição normal como distribuição a priori. Apesar de se confirmar a correlação entre os parâmetros após as simulações iniciais, optou-se por utilizar distribuições a priori independentes, com uma variância de magnitude menor, tendo as estimativas assim obtidas sido satisfatórias. Finalmente, para o parâmetro T_A , decidiu-se por utilizar como distribuição a priori a distribuição normal, tendo as estimativas sido bem satisfatórias.

As distribuições a priori por fim escolhidas e os correspondentes valores dos hiperparâmetros foram os seguintes:

$E_L \sim \text{Normal Truncada}(\mu_{E_L}, \sigma_{E_L}^2)$, $E_L \in (0,10)$, onde $\mu_{E_L} = 5$ e $\sigma_{E_L}^2 = 1000000$;

$E_H \sim \text{Normal}(\mu_{E_H}, \sigma_{E_H}^2)$, onde $\mu_{E_H} = 2395$ e $\sigma_{E_H}^2 = 1000000$;

$b_0 \sim \text{LogNormal}(\mu_{\ln(b_0)}, \sigma_{\ln(b_0)}^2)$, onde $\mu_{\ln(b_0)} = 0,004$ e $\sigma_{\ln(b_0)}^2 = 1000000$;

$\beta \sim \text{Normal Truncada}(\mu_\beta, \sigma_\beta^2)$, $\beta \in (0,1)$, onde $\mu_\beta = 0,4$ e $\sigma_\beta^2 = 1000000$;

$\theta_1 \sim \text{Normal}(\mu_{\theta_1}, \sigma_{\theta_1}^2)$, onde $\mu_{\theta_1} = 40$ e $\sigma_{\theta_1}^2 = 100$;

$\theta_2 \sim \text{Normal}(\mu_{\theta_2}, \sigma_{\theta_2}^2)$, onde $\mu_{\theta_2} = 300$ e $\sigma_{\theta_2}^2 = 100$;

$T_A \sim \text{Normal}(\mu_{T_A}, \sigma_{T_A}^2)$, onde $\mu_{T_A} = 8000$ e $\sigma_{T_A}^2 = 1000000$.

4.5.3 Implementação

De forma elementar, a inferência bayesiana traz como resultado uma distribuição a posteriori, que constitui de um compromisso entre a probabilidade a priori e a verossimilhança do valor do parâmetro para os dados. A função de verossimilhança e as distribuições a priori inicialmente consideradas no presente

estudo, para estimar os parâmetros de interesse por inferência bayesiana, foram apresentadas nas subseções 4.5.1 e 4.5.2. As distribuições a priori foram implementadas sem maiores percalços, o que já não ocorreu com a função de verossimilhança como explicado abaixo.

Como apresentado na sessão 4.5.1 a variável resposta de interesse associada à função de verossimilhança pela equação (81), correspondente ao módulo complexo de elasticidade. Esse módulo é dado pela equação (28). Contudo, o programa JAGS não reconhece os números complexos, conforme verificação feita no próprio programa. Ainda assim, foi feita uma consulta ao desenvolvedor (GELMAN, em mensagem pessoal recebida em 13 de março de 2015), que afirmou que nenhum dos programas de simulações MCMC em R utilizam números complexos.

Em vista dessa limitação, não foi possível utilizar diretamente a equação (28) na função de verossimilhança. No entanto, foi possível utilizar, de forma separada, a parte real e a parte imaginária do módulo complexo de elasticidade, como indicado, respectivamente, pelas equações (28) e (30), apresentadas na seção 2.7. As primeiras simulações foram feitas lançando mão dessa estratégia. Os resultados correspondentes à parte real foram bons, mas os associados a parte imaginária não alcançaram o mesmo patamar.

Buscou-se, então, uma outra alternativa, qual seja, a de trabalhar com o valor absoluto do módulo complexo. O valor absoluto do módulo complexo de elasticidade é igual a raiz quadrada da soma dos quadrados dos módulos de elasticidade real e imaginário. Essa alternativa, que foi adotada em definitivo, combina os valores observados para o módulo real e para o módulo imaginário em única quantidade real. Para tanto, é necessário utilizar a equação (29) na estimativa do módulo real a equação (30) para a estimativa do módulo imaginário e associar ambas as alternativas através da equação (11) para estimar, finalmente, o valor absoluto do módulo complexo de elasticidade.

Com as distribuições a priori e a função de verossimilhança determinadas, foi possível estimar as distribuições a posteriori dos parâmetros de interesse através de 100.000 simulações MCMC, com um período de *burn-in* da cadeia de 1.000 iterações. Sempre foram geradas 3 cadeias, com todas as iterações sendo

armazenadas. A convergência das cadeias, para cada parâmetro, foi analisada considerando os pressupostos apresentados na seção 3.2.2.

5 DESCRIÇÃO E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

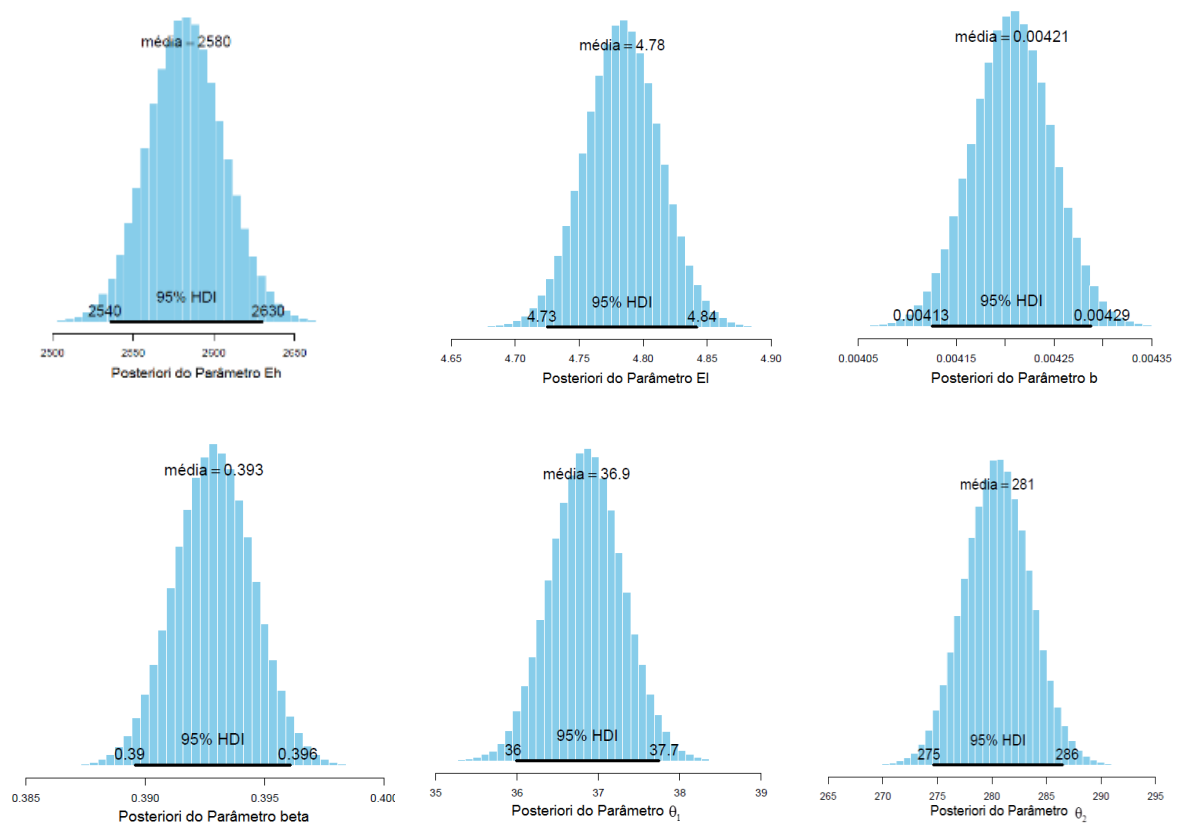
Neste capítulo, composto por seções, são apresentados e discutidos os resultados obtidos para os parâmetros das propriedades dinâmicas do material em estudo, através da análise bayesiana. A primeira seção apresenta os resultados das simulações para o modelo de derivada de ordem fracionária considerando o fator de deslocamento obtido através da equação WLF. Já a segunda seção expõe os resultados das simulações para o modelo de derivada de ordem fracionária considerando o fator de deslocamento obtido através da equação de Arrhenius. Por fim, na terceira seção, fez-se uma discussão final sobre os resultados obtidos através da utilização da abordagem bayesiana para se estimar as propriedades dinâmicas de materiais viscoelásticos.

5.2 RESULTADOS COM EQUAÇÃO WLF

Nesta seção, são apresentados os resultados da análise bayesiana para o modelo que estima o módulo complexo de elasticidade utilizando a equação empírica WLF no cálculo do fator de deslocamento. Este modelo estima, então, seis parâmetros, quatro advindos da equação da derivada de ordem fracionária mais dois correspondentes a equação WLF. Assim sendo, o vetor de parâmetros é $\Theta = \{E_L, E_H, b_0, \beta, \theta_1, \theta_2\}$.

A figura 27 apresenta os histogramas obtidos a partir das distribuições de probabilidade a posteriori resultantes para os parâmetros do modelo em questão. Cada histograma traz junto o valor estimado da média e o intervalo HDI de 95%, ou seja, o intervalo de 95% de confiabilidade (máxima densidade) para cada parâmetro. Este intervalo caracteriza a incerteza do parâmetro em torno da média.

FIGURA 26 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE – EQUAÇÃO WLF



A análise dos diagnósticos de convergência, expostos no Apêndice B, indicam que as cadeias convergiram para todos os parâmetros, ainda que, para os parâmetros θ_1 e θ_2 tenha sido identificada uma clara correlação entre eles. A tabela 1 resume os dados dos parâmetros obtidos através das distribuições de probabilidade a posteriori, com as informações da média, mediana, limites inferior e superior do intervalo de máxima densidade de 95% e ainda o desvio padrão da média.

TABELA 1 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA - EQUAÇÃO WLF

Parâmetro	Média	Mediana	Intervalo HDI		Desvio Padrão
			Limite Inferior	Limite Superior	
Eh	$2,58.10^3$	$2,58.10^3$	$2,54.10^3$	$2,63.10^3$	$2,40.10^1$
Ei	$4,78.10^0$	$4,78.10^0$	$4,73.10^0$	$4,84.10^0$	$2,94.10^{-2}$
b	$4,21.10^{-3}$	$4,21.10^{-3}$	$4,13.10^{-3}$	$4,29.10^{-3}$	$4,16.10^{-5}$
beta	$3,93.10^{-1}$	$3,93.10^{-1}$	$3,90.10^{-1}$	$3,96.10^{-1}$	$1,61.10^{-3}$
teta1	$3,69.10^1$	$3,69.10^1$	$3,60.10^1$	$3,78.10^1$	$4,51.10^{-1}$
teta2	$2,81.10^2$	$2,81.10^2$	$2,75.10^2$	$2,87.10^2$	$3,10.10^0$

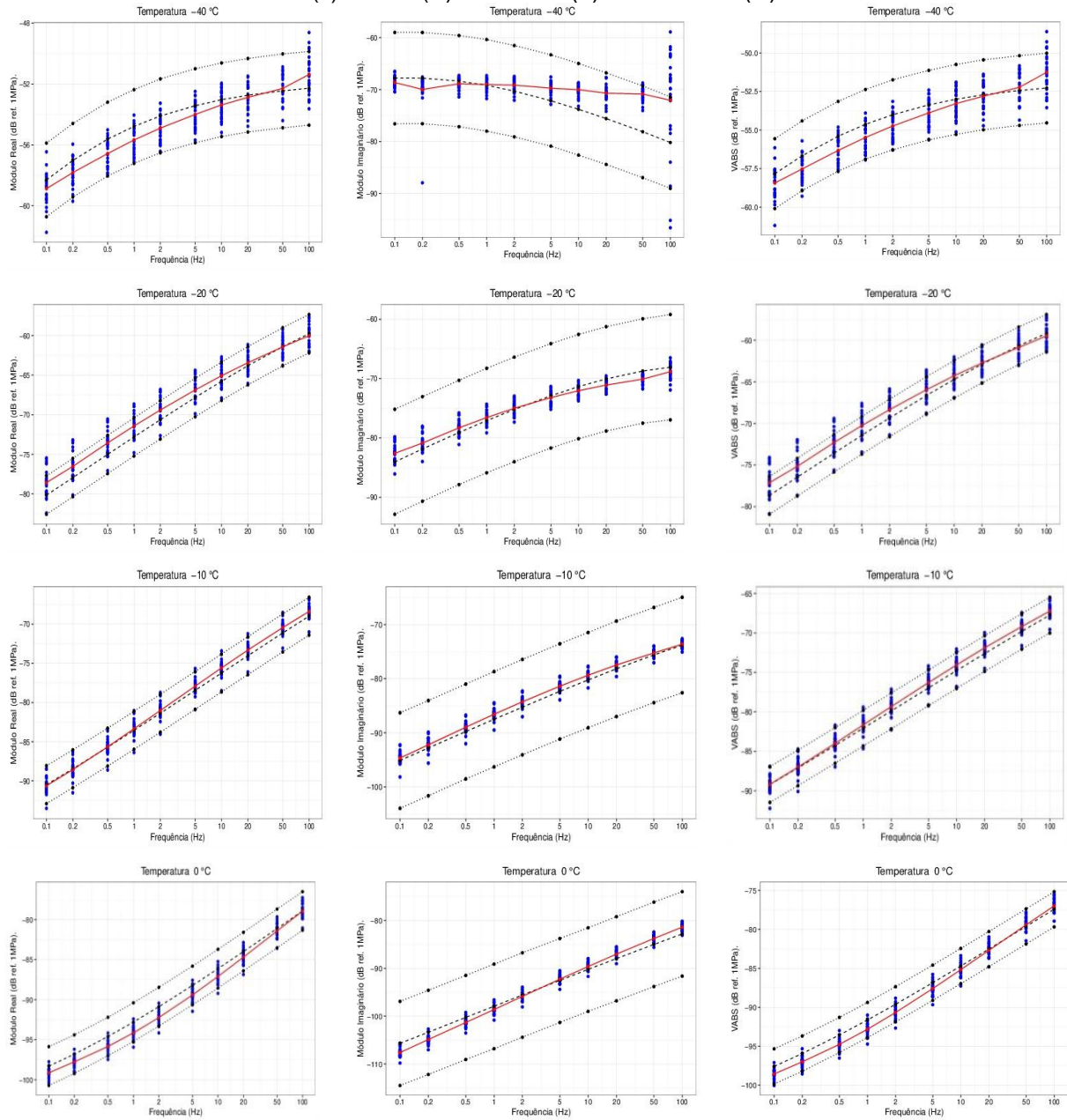
Para se chegar ao presente estágio foram percorridos os quatro primeiros passos da inferência bayesiana. Resta percorrer mais um passo, que é verificar se o modelo preditivo descreve apropriadamente os dados observados. Ainda que as distribuições a posteriori indiquem que foi possível chegar a um ajuste dos dados, não se sabe se o ajuste está adequado aos dados observados. Ou seja, é necessário conduzir uma verificação da predição a posteriori.

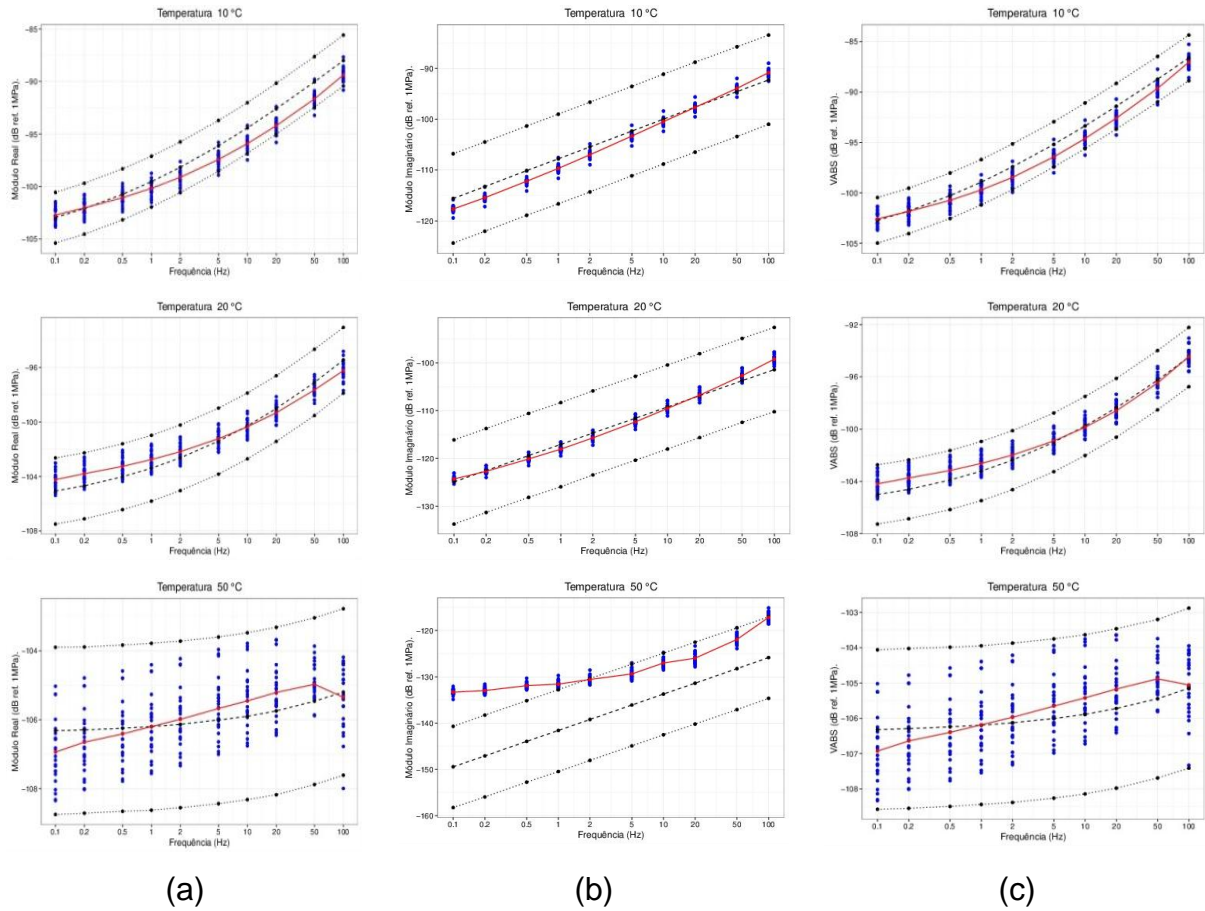
Giere (1988) explica que a hipótese que liga modelos matemáticos a dados empíricos não é a de que o processo de geração de dados é exatamente isomorfo ao modelo, mas de que a fonte dos dados se assemelha ao modelo de forma próxima o suficiente, pelo menos nos aspectos importantes para o pesquisador, de modo que o raciocínio com base no modelo seja confiável. Essa confiabilidade não requer plena fidelidade ao modelo. Portanto, o objetivo de verificar o modelo é encontrar aonde podem estar ocorrendo falhas e o que pode ser melhorado (GELMAN, 2003).

Para verificar se o modelo desvia sistemática e significativamente dos dados decidiu-se por utilizar uma abordagem baseada em Kruschke (2015), e é a seguinte. Apresenta-se, para cada temperatura, um diagrama da dispersão dos valores observados em cada frequência, com a sobreposição da média, e os percentis 2,5% e 97,5% da distribuição preditiva a posteriori. As estatísticas descritivas da distribuição preditiva de interesse são avaliadas a partir de uma amostra de 2.000 valores, extraídas da distribuição a posteriori obtida pelas simulações MCMC. A figura 27 mostra os gráficos para a verificação da predição a posteriori, considerando o modelo para a estimação do módulo real na primeira coluna, do módulo imaginário na próxima coluna e finalmente, na terceira, o do valor absoluto do módulo complexo de elasticidade (raiz da soma quadrática dos módulos real e

imaginário) que, por simplicidade é designado por vabs. Os gráficos são confeccionados em escala logarítmica, para a melhor visualização dos dados. Ainda para facilitar a comparação visual entre as tendências centrais observadas e os valores preditos, adicionou-se a cada gráfico a média das observações.

FIGURA 27 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO - EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--) PREDITO (··) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.

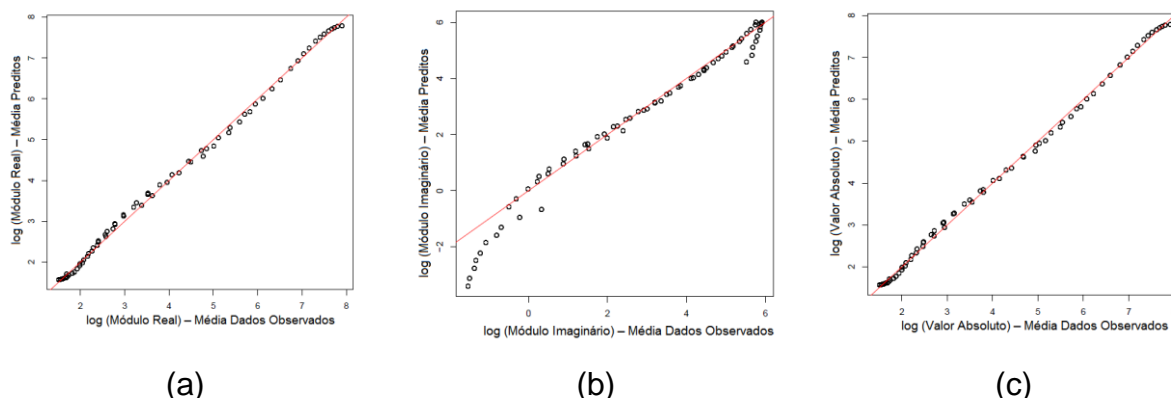




Os gráficos apresentados na figura 27 permitem visualizar situações em que há desvios da média preditiva em relação à média dos dados observados. No caso do módulo imaginário, esta diferença é mais perceptível, principalmente nas temperaturas extremas, quais sejam, -40°C e 50°C .

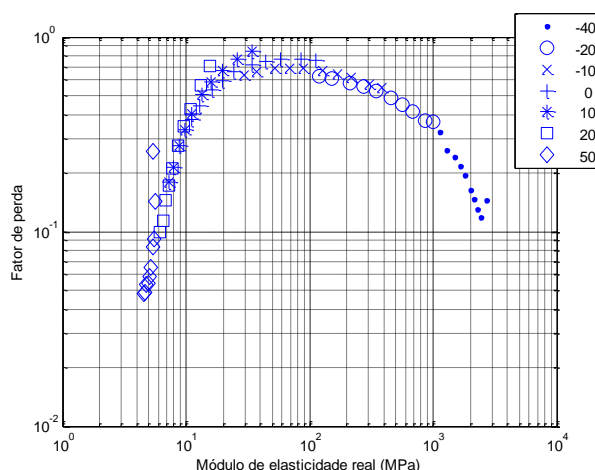
Para-se ter uma visão mais específica do desvio da média predita em relação aos dados observados, a figura 28 apresenta os gráficos da dispersão entre as médias dos valores preditos versus dados observados para o módulo real, o módulo imaginário e o valor absoluto do módulo de elasticidade. Observa-se, na figura 28, que os valores preditos do módulo imaginário apresentam um desvio acentuado nos valores mais extremos. Contudo, para o modelo correspondente ao valor absoluto, constata-se que o ajuste prediz de forma satisfatória os dados.

FIGURA 28 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS



Ainda assim, investigou-se mais detalhadamente o conjunto de dados experimentais, de modo a detectar eventuais valores que pudessem estar comprometendo os resultados. Através da análise dos gráficos *wicket* dos dados experimentais, notou-se uma discrepância em algumas observações referentes as temperaturas de -40°C e 50°C , nas frequências 50Hz e 100Hz. Nesta verificação, foram analisados os gráficos de todos os ensaios, que podem ser encontrados em Balbino (2012). Para ilustrar os gráficos *wicket* dos dados experimentais, a figura 29 apresenta o gráfico para a média dos dados observados.

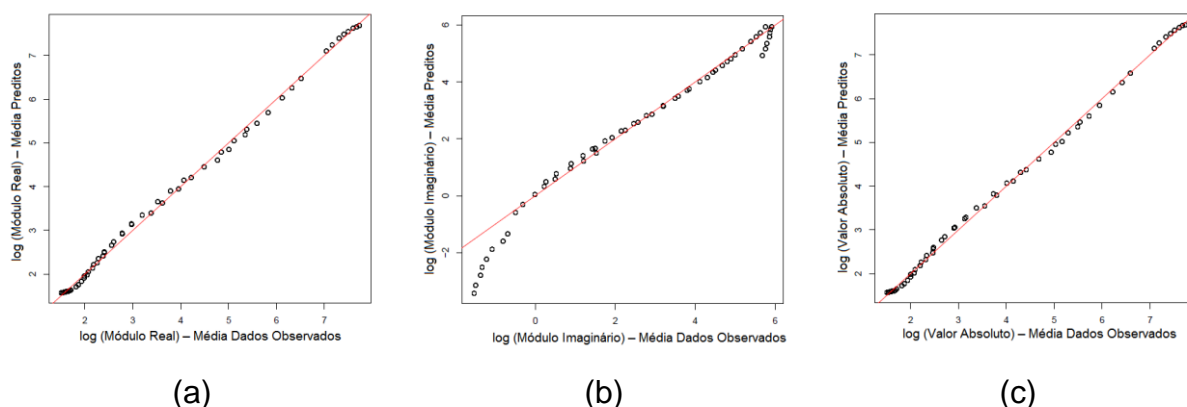
FIGURA 29 – WICKET PLOT PARA AS MÉDIAS DOS DADOS OBSERVADOS.



A figura 30 apresenta os gráficos dos valores preditos versus dados observados, retirando da análise os dados referentes às frequências de 50Hz e 100Hz das temperaturas de -40°C e 50°C . Observa-se que não houve substancial

diferença nos resultados. Seria possível ainda fazer a retirada de mais frequências nestas mesmas temperaturas, no entanto, este procedimento implicaria na redução do conjunto de dados e, com isto, perda de informações necessárias para uma correta caracterização dinâmica do material viscoelástico.

FIGURA 30 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EXCLUINDO FREQUÊNCIAS 50HZ E 100HZ DAS TEMPERATURAS -40°C E 50°C – EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS



Em um primeiro momento, para aplicar a abordagem bayesiana e realizar uma análise completa de seus resultados, pensou-se em conduzir um planejamento experimental completo, inclusive com o cálculo do tamanho de amostra para o experimento. Por razões técnicas, não foi possível conduzir um novo experimento, recorrendo-se, então, aos dados de um experimento anterior. De toda forma, durante as análises, houve a tentativa de se verificar qual seria um bom tamanho de amostra, dado que já existia um experimento anterior.

Devido ao componente estocástico, o objetivo de um estudo pode ser alcançado probabilisticamente. A probabilidade de alcançar o objetivo do estudo, dadas as suas hipóteses e o plano experimental é chamado de poder. Por exemplo, no caso de teste de hipóteses, o poder do teste é a probabilidade de rejeitar a hipótese nula. O objetivo do pesquisador é tentar aumentar o poder de seus experimentos ou estudos observacionais.

Uma forma de se aumentar o poder é aumentar o tamanho da amostra. Isto se deve ao fato de que, com mais valores observados, o erro aleatório tende a se cancelar. Portanto, a medida em que o tamanho de amostra aumenta, a precisão da

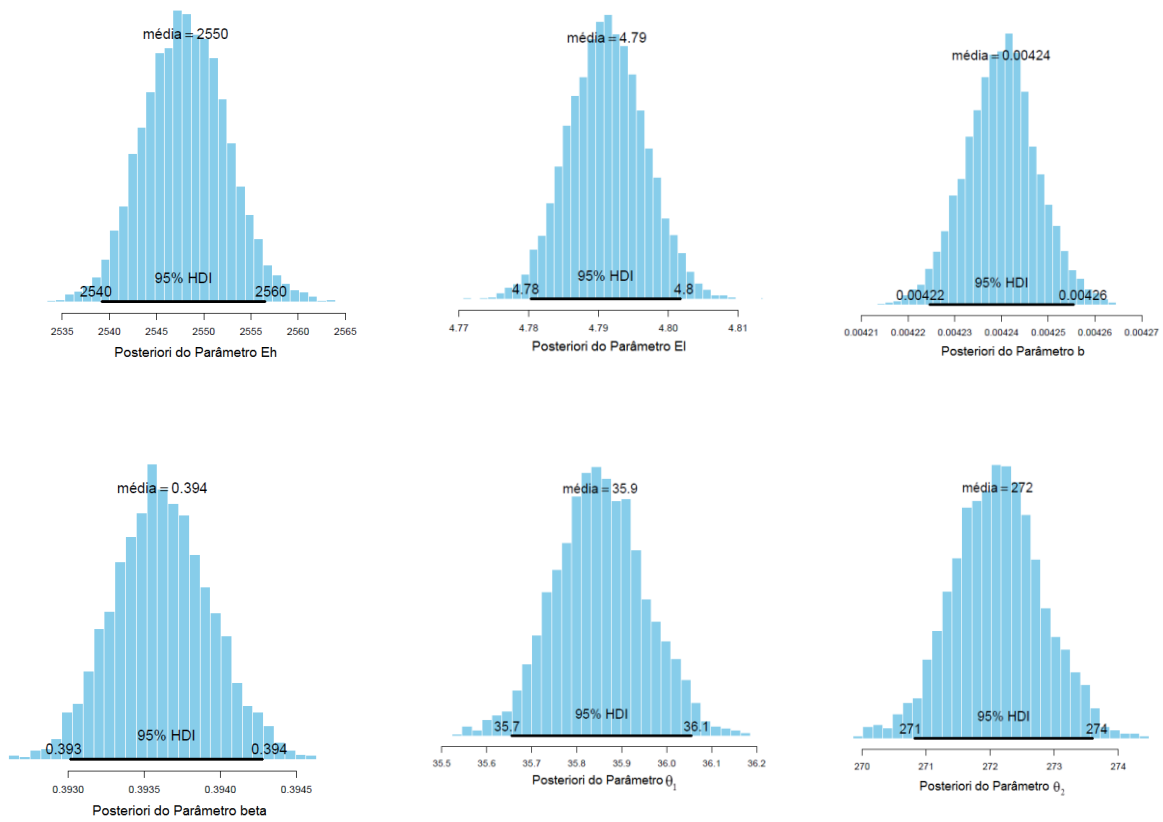
estimativa do parâmetro também aumenta. Entretanto, é interessante saber o tamanho mínimo de amostra para conseguir o poder desejado.

Não existe uma forma padrão de calcular o tamanho de amostra para na abordagem bayesiana. Para entender como o tamanho de amostra pode influenciar os resultados bayesianos, adotou-se aqui uma abordagem que aumenta o tamanho original da amostra por intermédio de reamostragem para posteriormente aproximar as distribuições a posteriori dos parâmetros de interesse. A reamostragem é realizada pelo *bootstrap* bayesiano (BB).

O *bootstrap* bayesiano (BB) demanda alto custo computacional. Desta forma, de modo a ilustrar a técnica, foi feito um BB com um tamanho de amostra de 40 observações, retiradas 20 vezes. Após serem obtidas novas amostras, o processo bayesiano foi simulado novamente, para nova estimação dos parâmetros. A análise dos gráficos de diagnósticos da cadeia para o BB indica convergência, porém, com maior esforço computacional.

A figura 31 apresenta os histogramas obtidos a partir das distribuições de probabilidade a posteriori resultantes do BB para os parâmetros estimados do modelo. Verifica-se que houve uma aproximação da distribuição a posteriori em relação a cada parâmetro, conforme esperado.

FIGURA 31 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE VIA BB. EQUAÇÃO WLF.



A tabela 2 resume os dados dos parâmetros estimados através das distribuições de probabilidade a posteriori via BB. Em comparação com a tabela 1, nota-se que houve um aumento da precisão das estimativas dos parâmetros.

TABELA 2 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA VIA BB - EQUAÇÃO WLF

Parâmetro	Média	Mediana	Intervalo HDI		Desvio Padrão
			Limite Inferior	Limite Superior	
Eh	$2,55 \cdot 10^3$	$2,55 \cdot 10^3$	$2,54 \cdot 10^3$	$2,56 \cdot 10^3$	$4,04 \cdot 10^0$
Ei	$4,80 \cdot 10^0$	$4,80 \cdot 10^0$	$4,79 \cdot 10^0$	$4,81 \cdot 10^0$	$4,92 \cdot 10^{-3}$
b	$4,23 \cdot 10^{-3}$	$4,23 \cdot 10^{-3}$	$4,21 \cdot 10^{-3}$	$4,24 \cdot 10^{-3}$	$6,97 \cdot 10^{-6}$
beta	$3,94 \cdot 10^{-1}$	$3,94 \cdot 10^{-1}$	$3,94 \cdot 10^{-1}$	$3,95 \cdot 10^{-1}$	$2,83 \cdot 10^{-4}$
θ_1	$3,58 \cdot 10^1$	$3,58 \cdot 10^1$	$3,56 \cdot 10^1$	$3,60 \cdot 10^1$	$9,22 \cdot 10^{-2}$
θ_2	$2,72 \cdot 10^2$	$2,72 \cdot 10^2$	$2,71 \cdot 10^2$	$2,74 \cdot 10^2$	$6,37 \cdot 10^{-1}$

A tabela 3 apresenta um comparativo entre os dados obtidos pela inferência bayesiana e o *bootstrap* bayesiano com o objetivo de mostrar a redução percentual obtida no desvio padrão do intervalo HDI dos parâmetros estimados considerando as duas técnicas.

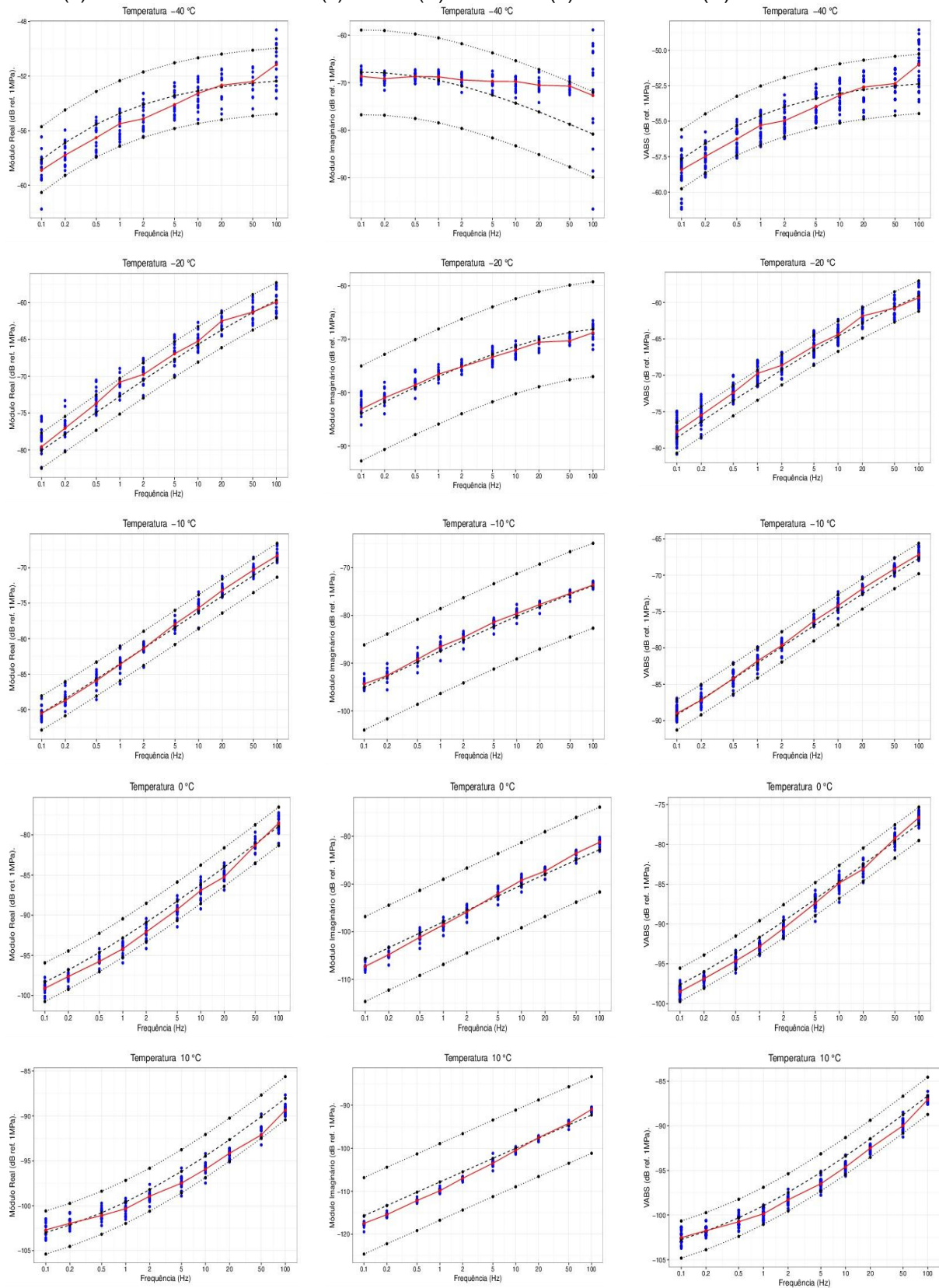
TABELA 3 - RESUMO DESCRITIVO COMPARATIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA E VIA BB - EQUAÇÃO WLF

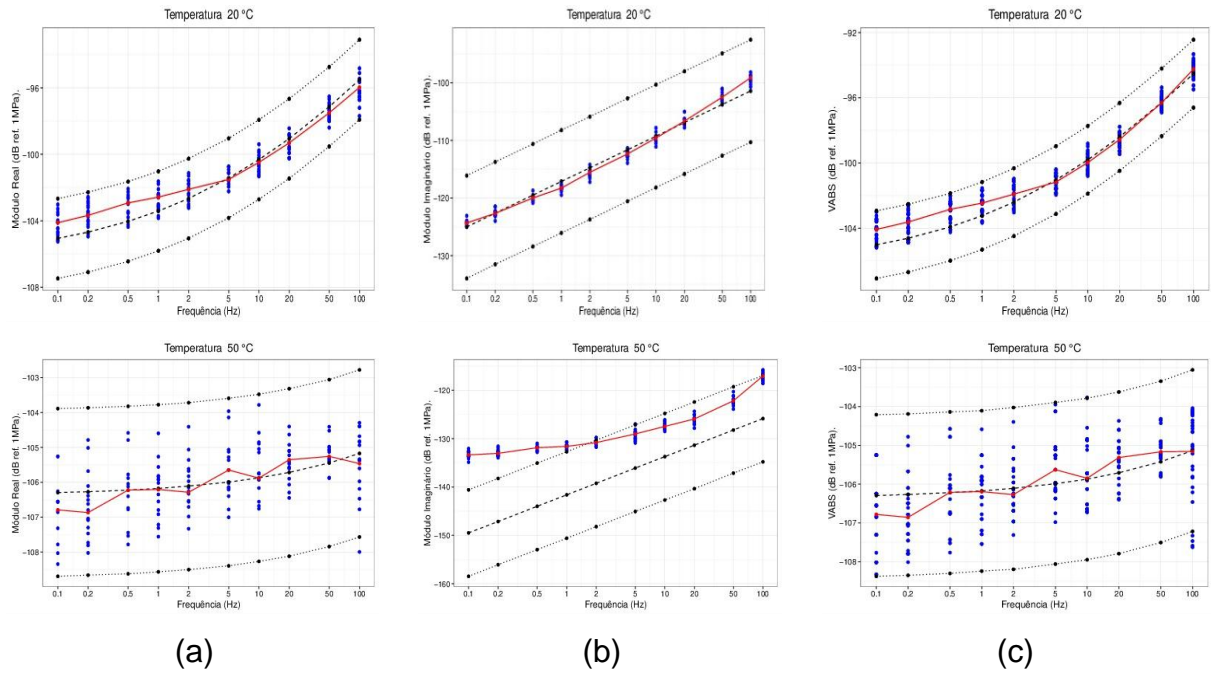
Parâmetro	Média	Média via BB	Intervalo HDI		Intervalo HDI via BB		Desvio Padrão	Desvio Padrão via BB	Redução Percentual Desvio Padrão.(%)
			Limite Inferior	Limite Superior	Limite Inferior	Limite Superior			
Eh	$2,58.10^3$	$2,55.10^3$	$2,54.10^3$	$2,63.10^3$	$2,54.10^3$	$2,56.10^3$	$2,40.10^1$	$4,04.10^0$	83,20
EI	$4,78.10^0$	$4,80.10^0$	$4,73.10^0$	$4,84.10^0$	$4,79.10^0$	$4,81.10^0$	$2,94.10^{-2}$	$4,92.10^{-3}$	83,28
b	$4,21.10^{-3}$	$4,23.10^{-3}$	$4,13.10^{-3}$	$4,29.10^{-3}$	$4,21.10^{-3}$	$4,24.10^{-3}$	$4,16.10^{-5}$	$6,97.10^{-6}$	83,23
beta	$3,93.10^{-1}$	$3,94.10^{-1}$	$3,90.10^{-1}$	$3,96.10^{-1}$	$3,94.10^{-1}$	$3,95.10^{-1}$	$1,61.10^{-3}$	$2,83.10^{-4}$	82,45
θ_1	$3,69.10^1$	$3,58.10^1$	$3,60.10^1$	$3,78.10^1$	$3,56.10^1$	$3,60.10^1$	$4,51.10^{-1}$	$9,22.10^{-2}$	79,54
θ_2	$2,81.10^2$	$2,72.10^2$	$2,75.10^2$	$2,87.10^2$	$2,71.10^2$	$2,74.10^2$	$3,10.10^0$	$6,37.10^{-1}$	79,44

Houve uma redução percentual de até 83% no valor do desvio padrão dos parâmetros ao considerar a técnica de *bootstrap* bayesiano. Lembrando que esta técnica além de exigir um maior esforço computacional também é uma técnica de inferência. Portanto, não se pode ter certeza que o verdadeiro valor da média está contido dentro do intervalo HDI estimado, contudo, feitas as análises de adequação do modelo, verifica-se que o modelo se ajusta aos dados que foram observados experimentalmente. É importante notar que, conforme aumenta o tamanho de amostra, aumenta a precisão das estimativas.

Também para o BB, foi feita a verificação do modelo preditivo. A figura 32 apresenta os gráficos para a verificação da predição a posteriori, considerando o modelo para a estimação do módulo real na primeira coluna, o módulo imaginário na segunda coluna e, finalmente o correspondente ao valor absoluto módulo complexo de elasticidade, designado por vabs, na terceira coluna, da esquerda para direita.

FIGURA 32 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO VIA BB - EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--) PREDITO (·) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.

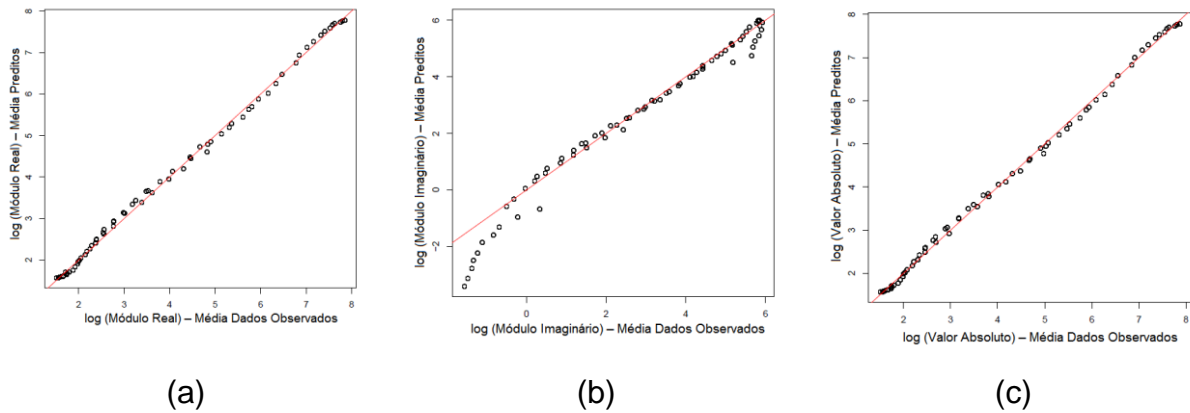




Assim como na figura 27, nota-se uma maior dispersão dos dados nas temperaturas extremas, -40°C e 50°C. Ou seja, não existe uma mudança no comportamento do modelo, o que é esperado, já que no BB as novas amostras são retiradas dos dados observados originalmente.

Para ter uma visão mais específica do desvio da média predita em relação aos dados observados via BB, a figura 33 apresenta os gráficos entre a média dos valores preditos versus os dados observados para o módulo real, o módulo imaginário e o valor absoluto. Conforme observado anteriormente, o módulo imaginário continua apresentando desvio em relação aos dados observados. Entretanto, nota-se um menor peso no modelo final, mantendo-se, a suposição de que o modelo representa bem os dados observados.

FIGURA 33 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS VIA BB – EQUAÇÃO WLF. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS



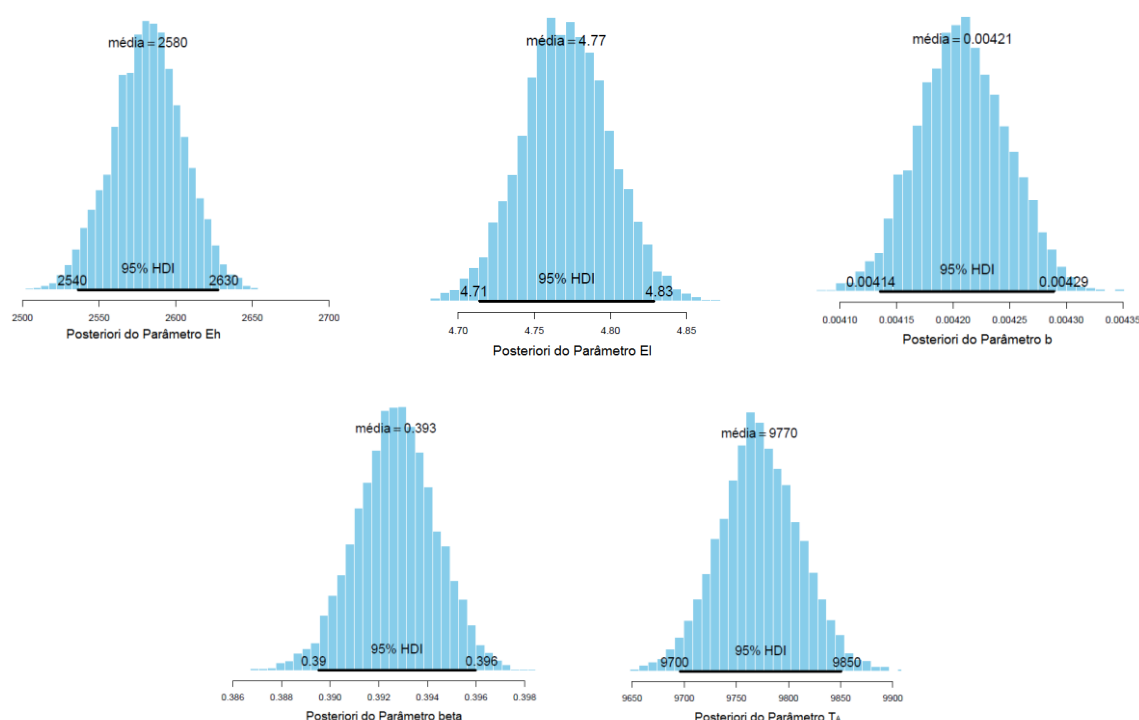
O BB aproxima a distribuição do parâmetro, ou seja, o intervalo de máxima densidade é mais estreito em torno da média estimada, posto que o tamanho de amostra é maior. No entanto, é necessário considerar que o esforço computacional é bastante grande, e é preciso avaliar os custos deste esforço ao se empregar esta metodologia.

5.3 RESULTADOS COM EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

De forma análoga ao que foi feito na seção anterior, são apresentados nesta seção os resultados da análise bayesiana para o modelo que estima o módulo complexo de elasticidade utilizando a equação teórica de Arrhenius no cálculo do fator de deslocamento. Este modelo estima cinco parâmetros, quatro advindos da equação de derivada de ordem fracionária mais um advindo da equação de Arrhenius. Então, o vetor de parâmetros é $\Theta = \{E_L, E_H, b_0, \beta, T_A\}$.

A figura 35 apresenta os histogramas obtidos a partir das distribuições de probabilidade a posteriori resultantes para os parâmetros estimados do modelo em tela, incluindo, para cada parâmetro, o valor estimado da média e o intervalo HDI de 95%.

FIGURA 34 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE - EQUAÇÃO ARRHENIUS.



Os diagnósticos de convergência das cadeias para os parâmetros deste modelo, expostos no Apêndice C, indicam convergência. Neste caso, observou-se um esforço computacional menor, tendo a convergência sido alcançada de forma mais rápida. Isto se deve ao fato de que o modelo tem um parâmetro a menos e este parâmetro não é correlacionado com nenhum outro da análise.

A tabela 3 resume os dados dos parâmetros obtidos através das distribuições de probabilidade a posteriori, com as informações da a média, mediana, limites inferior e superior do intervalo de máxima densidade com 95% de confiança e ainda o desvio padrão para média.

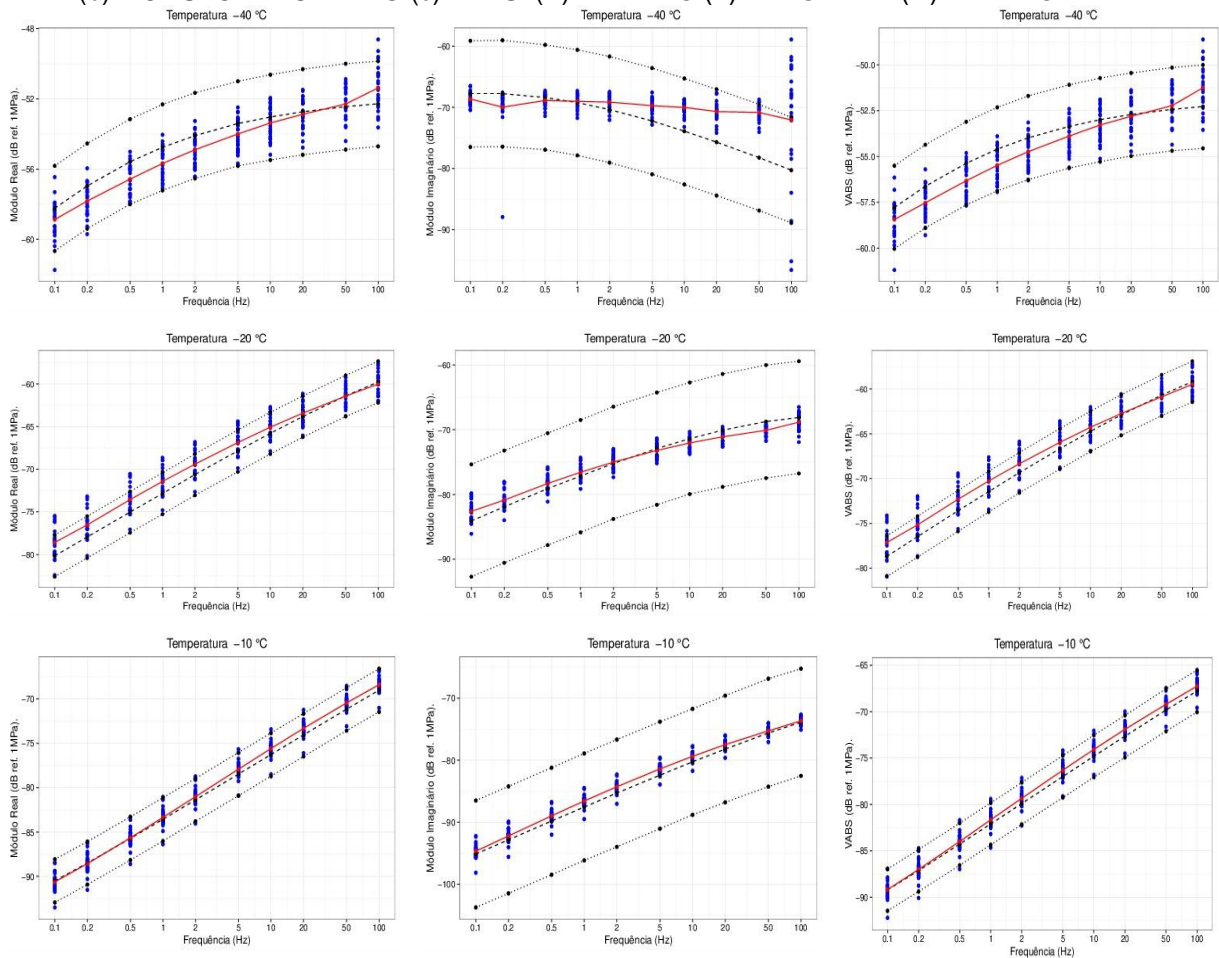
TABELA 4 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

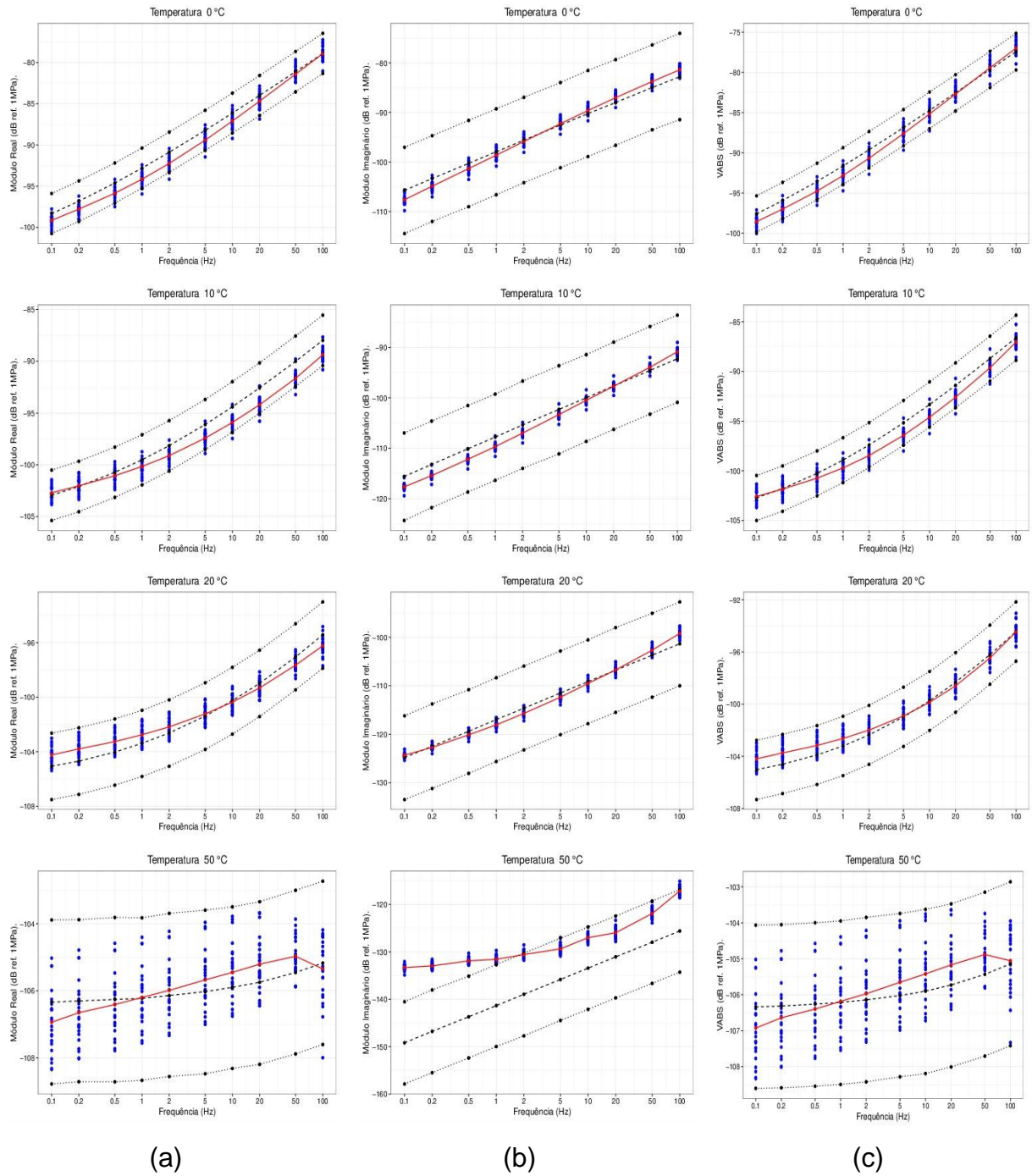
Parâmetro	Média	Mediana	Intervalo HDI		Desvio Padrão
			Limite Inferior	Limite Superior	
Eh	$2,58.10^3$	$2,58.10^3$	$2,53.10^3$	$2,63.10^3$	$2,43.10^1$
Ei	$4,77.10^0$	$4,77.10^0$	$4,71.10^0$	$4,83.10^0$	$2,90.10^{-2}$
b	$4,21.10^{-3}$	$4,21.10^{-3}$	$4,13.10^{-3}$	$4,29.10^{-3}$	$4,13.10^{-5}$
beta	$3,93.10^{-1}$	$3,93.10^{-1}$	$3,89.10^{-1}$	$3,96.10^{-1}$	$1,65.10^{-3}$
TA	$9,77.10^3$	$9,77.10^3$	$9,70.10^3$	$9,85.10^3$	$3,90.10^1$

A análise descritiva das estimativas dos parâmetros para o modelo utilizando a equação de Arrhenius mostra que os quatro parâmetros referentes ao modelo de derivada de ordem fracionária foram estimados de forma muito semelhante ao modelo utilizando a equação WLF. Este é um comportamento esperado, já que a literatura descreve que ambas equações podem ser utilizadas para se descrever o fator de deslocamento de forma satisfatória (MEAD, 1999; JONES, 1990).

Para o modelo em tela, realizou-se também a verificação do modelo preditivo. Utilizando a mesma abordagem já exposta na seção anterior, são gerados os gráficos apresentados na figura 35.

FIGURA 35 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO - EQUAÇÃO DE ARRHENUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--) PREDITO (··) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.

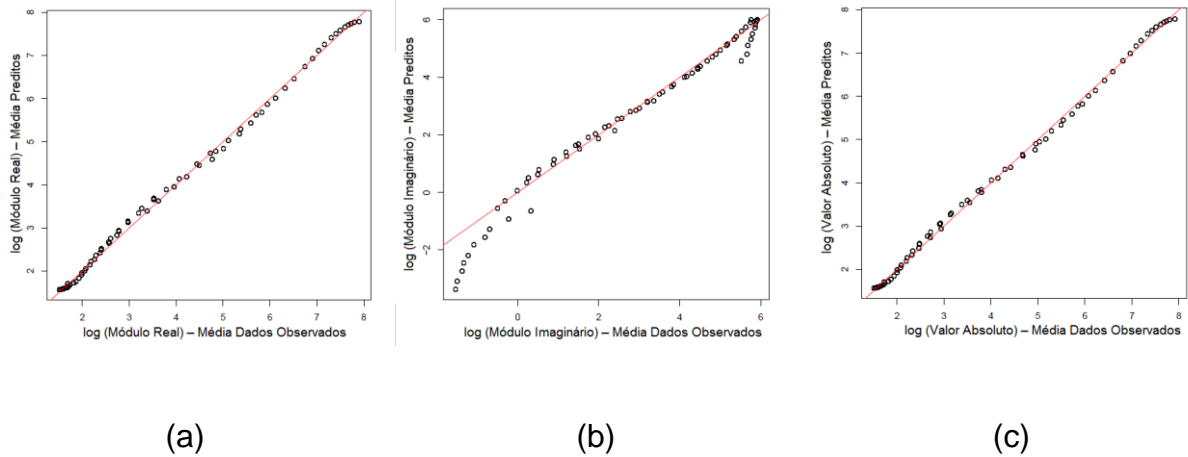




Assim como observado no modelo anterior, aqui também é possível visualizar situações em que há desvios da média preditiva em relação à média dos dados observados nas temperaturas mais extremas, quais sejam, -40°C e 50°C. Para se ter uma visão mais específica do desvio da média predita em relação aos dados observados, a figura 36 apresenta os gráficos da dispersão entre as médias

dos valores preditos versus dados observados para o módulo real, o módulo imaginário e o valor absoluto do módulo complexo de elasticidade.

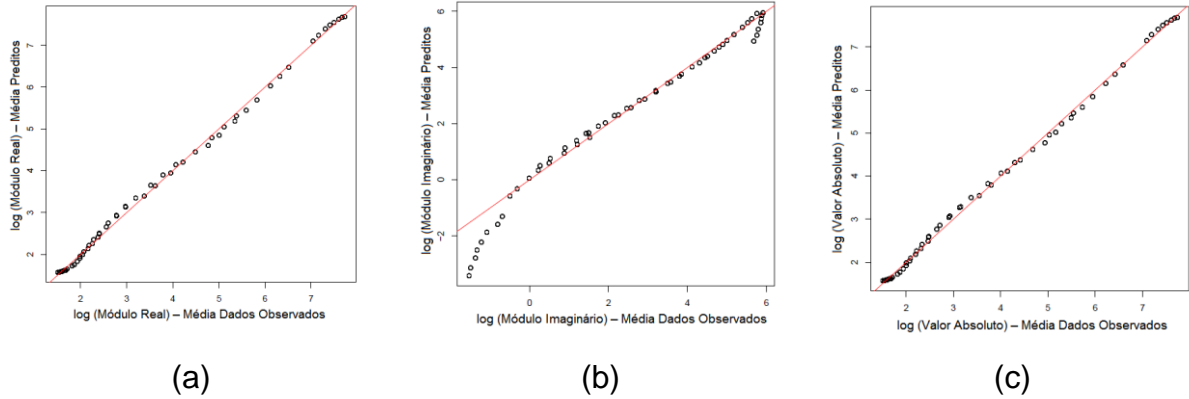
FIGURA 36 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS



A figura 36 mostra que, também ao se utilizar a equação de Arrhenius, o módulo imaginário parece se afastar mais dos dados observados. No entanto, este módulo não tem um peso excessivo no modelo final, que corresponde à raiz quadrada da soma quadrática dos módulos real e imaginário. Ainda que o modelo bayesiano utilizando a equação de Arrhenius seja mais eficiente na geração das simulações, ele não mostra uma melhoria na aproximação dos valores preditos dos dados observados.

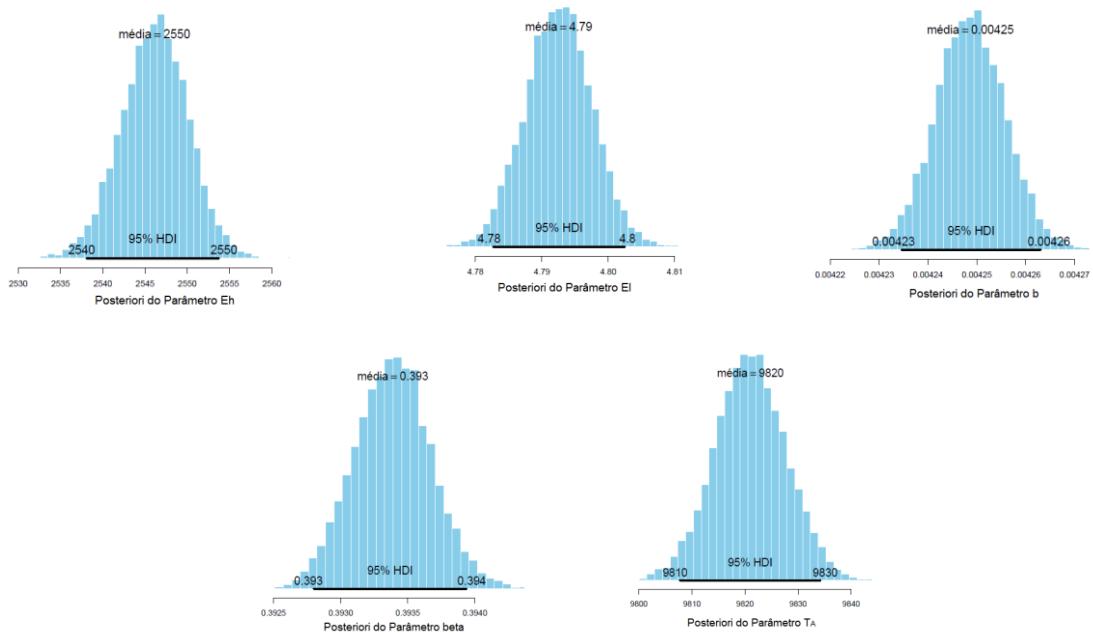
A exemplo do que foi feito na seção anterior, a figura 37 ilustra os gráficos da média dos valores preditos versus dados observados retirando os dados associados às frequências de 50Hz e 100Hz, nas temperaturas de -40°C e 50°C. No entanto, o resultado observado é o mesmo já alcançado anteriormente com a equação WLF.

FIGURA 37 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS – EXCLUÍDO FREQUÊNCIAS 50HZ E 100HZ DAS TEMPERATURAS -40°C E 50°C – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS



A aplicação do *bootstrap* bayesiano (BB) utilizando a equação de Arrhenius, foi feita da mesma forma que aquela para o BB utilizando a equação WLF. A figura 38 apresenta os histogramas obtidos a partir das distribuições de probabilidade a posteriori resultantes para os parâmetros estimados do modelo.

FIGURA 38 – DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE A POSTERIORI DOS PARÂMETROS DO MÓDULO COMPLEXO DE ELASTICIDADE VIA BB – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS.



A tabela 4 resume os dados referentes aos parâmetros estimados através das distribuições de probabilidade a posteriori via BB. Essa tabela corrobora a

identificação gráfica, mostrando que houve um aumento de previsão das estimativas dos parâmetros ao se utilizar uma amostra de tamanho maior.

TABELA 5 - RESUMO DESCRITIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA VIA BB – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

Parâmetro	Média	Mediana	Intervalo HDI		Desvio Padrão
			Limite Inferior	Limite Superior	
Eh	$2,55.10^3$	$2,55.10^3$	$2,54.10^3$	$2,55.10^3$	$3,97.10^0$
Ei	$4,79.10^0$	$4,79.10^0$	$4,78.10^0$	$4,80.10^0$	$5,03.10^{-3}$
b	$4,25.10^{-3}$	$4,25.10^{-3}$	$4,23.10^{-3}$	$4,26.10^{-3}$	$7,22.10^{-6}$
beta	$3,93.10^{-1}$	$3,93.10^{-1}$	$3,93.10^{-1}$	$3,94.10^{-1}$	$2,87.10^{-4}$
TA	$9,82.10^3$	$9,82.10^3$	$9,81.10^3$	$9,83.10^3$	$6,70.10^0$

Bem como feito na seção anterior, a tabela 6 apresenta um comparativo entre os dados obtidos através da inferência bayesiana e o *bootstrap* bayesiano para indicar a redução percentual no desvio padrão do intervalo HDI dos parâmetros estimados.

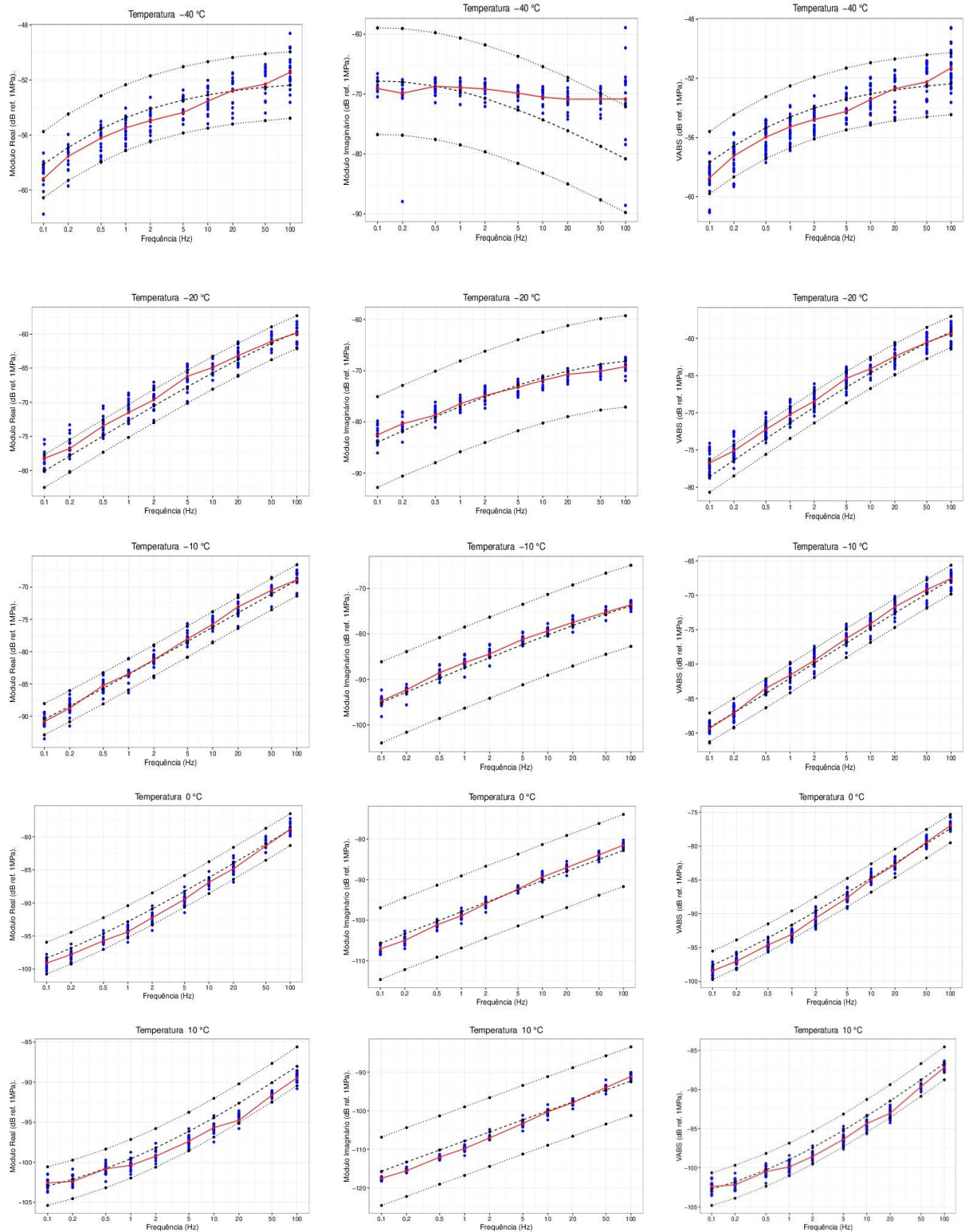
TABELA 6 - RESUMO DESCRITIVO COMPARATIVO DOS PARÂMETROS ESTIMADOS ATRAVÉS DA ANÁLISE BAYESIANA E VIA BB - EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

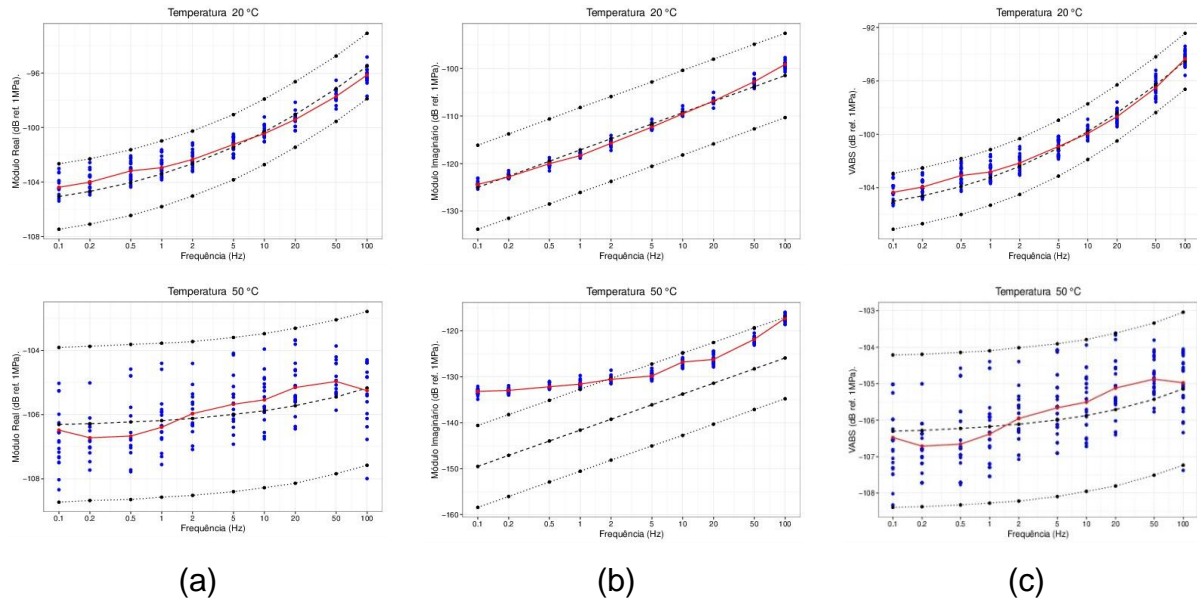
Parâmetro	Média	Média via BB	Intervalo HDI		Intervalo HDI via BB		Desvio Padrão	Desvio Padrão via BB	Redução Percentual Desvio Padrão. (%)
			Limite Inferior	Limite Superior	Limite Inferior	Limite Superior			
Eh	$2,58.10^3$	$2,55.10^3$	$2,53.10^3$	$2,63.10^3$	$2,54.10^3$	$2,55.10^3$	$2,43.10^1$	$3,97.10^0$	83,65
Ei	$4,77.10^0$	$4,79.10^0$	$4,71.10^0$	$4,83.10^0$	$4,78.10^0$	$4,80.10^0$	$2,90.10^{-2}$	$5,03.10^{-3}$	82,67
b	$4,21.10^{-3}$	$4,25.10^{-3}$	$4,13.10^{-3}$	$4,29.10^{-3}$	$4,23.10^{-3}$	$4,26.10^{-3}$	$4,13.10^{-5}$	$7,22.10^{-6}$	82,53
beta	$3,93.10^{-1}$	$3,93.10^{-1}$	$3,89.10^{-1}$	$3,96.10^{-1}$	$3,93.10^{-1}$	$3,94.10^{-1}$	$1,65.10^{-3}$	$2,87.10^{-4}$	82,55
TA	$9,77.10^3$	$9,82.10^3$	$9,70.10^3$	$9,85.10^3$	$9,81.10^3$	$9,83.10^3$	$3,90.10^1$	$6,70.10^0$	82,83

Também aqui nota-se uma redução de até 83% no desvio padrão dos parâmetros, resultado semelhante a quando se utiliza a equação WLF. Como se utiliza o mesmo conjunto de dados para simular o *bootstrap* bayesiano, este é um resultado esperado. Consideram-se aqui, portanto, os mesmos comentários feitos anteriormente.

A figura 39 apresenta a verificação do modelo preditivo obtido via BB utilizando a equação de Arrhenius.

FIGURA 39 – VERIFICAÇÃO DO MODELO PREDITIVO VIA BB - EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS. (--) PREDITO (··) PERCENTIL (—) MÉDIA OBSERVADA.

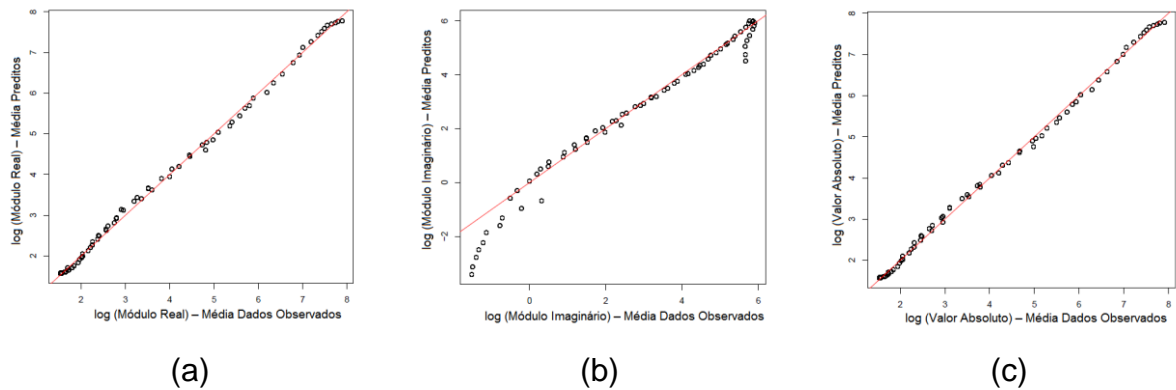




Os resultados continuam sinalizando uma dispersão maior dos dados preditos nas temperaturas de -40°C e 50°C. Torna-se a observar que o BB retira amostras dos dados originais, e, portanto, o modelo predito acompanha os dados.

A figura 40, que apresenta os valores preditos versus dados observados, corrobora que tanto o modelo bayesiano associado aos dados originais quanto o modelo via BB estimam os dados com a mesma aproximação da média predita em relação aos dados observados. Ressalta-se novamente o esforço computacional dispendido nesse procedimento de reamostragem.

FIGURA 40 – MÉDIA DOS VALORES PREDITOS VERSUS DADOS OBSERVADOS VIA BB – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS. (a) MÓDULO REAL (b) MÓDULO IMAGINÁRIO (c) VABS



5.4 DISCUSSÃO FINAL

Com intuito de consolidar o que foi explanado durante o presente estudo pode-se dizer que, para se conhecer o comportamento dinâmico de um material viscoelástico, este é ensaiado em uma ampla faixa de temperaturas e frequências. Se o material for termoreologicamente simples, os resultados das várias curvas em temperatura, ao longo da frequência, podem ser sobrepostos e apresentadas convenientemente em um gráfico chamado nomograma frequência reduzida. O material que apresenta uma curva simétrica para o fator de perda é bem representado por um modelo de derivada de ordem fracionária de quatro parâmetros.

Para descrever a dependência em temperatura, pode-se adotar uma equação para estimar o seu fator de deslocamento correspondente. Na literatura, duas equações se destacam, a equação WLF e a equação de Arrhenius. O fator de deslocamento está associado aos deslocamentos em frequência das curvas em temperatura, deslocamentos esses que são realizados para se efetuar a superposição das curvas.

Usualmente, para se obter os parâmetros viscoelásticos de interesse, é aplicado o método de mínimos quadrados. Porém, esta metodologia não leva em conta as incertezas do modelo. Com isto, surge a possibilidade de utilizar outros métodos estatísticos que possam suprir esta necessidade, como a abordagem bayesiana.

Gogu (2009) compara o processo de identificação de constantes elásticas pelo método de mínimos quadrados com método bayesiano. Ele conclui que a utilização do método bayesiano traz resultados mais satisfatórios do que o método de mínimos quadrados, ao identificar funções distribuição de probabilidade para caracterização das propriedades, sendo possível, então, avaliar as incertezas do modelo.

Os resultados alcançados no presente estudo revelam que é possível fazer a estimativa dos parâmetros da caracterização dinâmica de materiais viscoelásticos levando em consideração as incertezas do modelo. Para cada parâmetro, foi estimada uma distribuição de probabilidade, de onde é possível calcular as

estimativas que forem de interesse do pesquisador, em um projeto de controle de vibrações, seja ele passivo ou misto (passivo e ativo).

As figuras 41 e 42 apresentam nomogramas de frequência reduzida para os dados referentes à média dos valores estimados para os modelos com a equação WLF e a equação de Arrhenius, respectivamente. Esses nomogramas ilustram que é possível utilizar as estimativas obtidas na inferência bayesiana para conhecer o comportamento dinâmico do material em estudo. Como incorporar as incertezas no projeto de controle é algo que se propõe como sugestão para trabalhos futuros.

FIGURA 41 – NOMOGRAMA DE FREQUÊNCIA REDUZIDA DAS MÉDIAS PREDITAS – EQUAÇÃO WLF

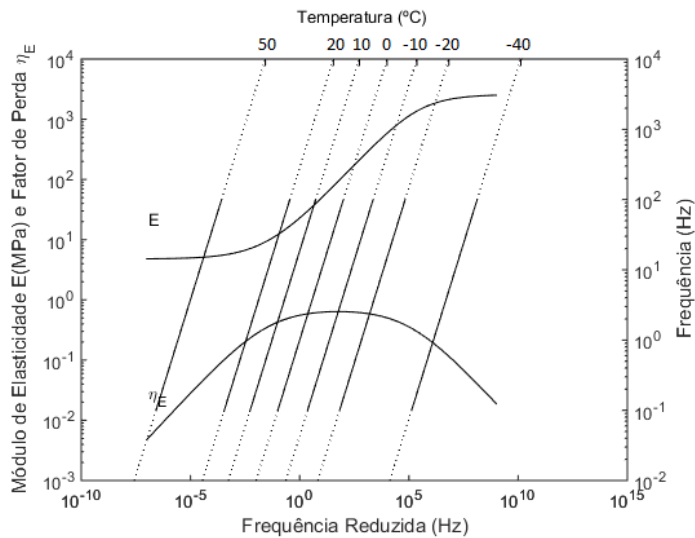
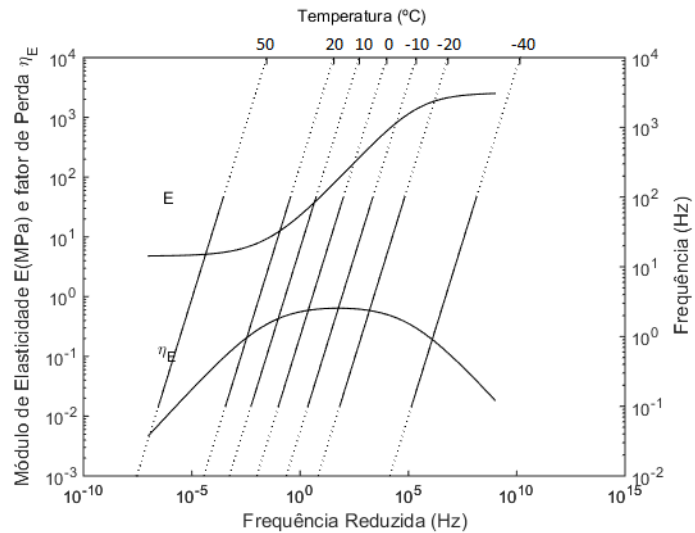


FIGURA 42 – NOMOGRAMA DE FREQUÊNCIA REDUZIDA DAS MÉDIAS PREDITAS – EQUAÇÃO DE ARRHENIUS



6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

6.1 CONCLUSÕES

A inferência bayesiana foi aplicada, com sucesso e de forma inédita, na caracterização dinâmica de um material viscoelástico, descrito pelo modelo de derivada de ordem fracionária com quatro parâmetros, conjugado ou com a equação WLF, de dois parâmetros, ou com a equação de Arrhenius, de um parâmetro. Foram empregados, para tanto, dados experimentais obtidos ao longo de ampla faixa de frequência e temperatura. O modelo bayesiano estimou, de forma bem mais elucidativa, os parâmetros das propriedades dinâmicas do material viscoelástico em estudo, sendo que o modelo ajustado aproximou-se dos dados observados de forma satisfatória.

Especificamente, foram atribuídos, aos parâmetros de interesse, distribuições a priori, de forma univariada. Determinou-se, complementarmente, uma função de verossimilhança que pudesse considerar tanto as informações de módulo real quanto as de módulo imaginário, numa única grandeza real, qual seja, o valor absoluto do módulo complexo de elasticidade. Isso possibilitou a implementação da abordagem bayesiana desejada através dos programas computacionais R e JAGS, largamente utilizados na estatística e probabilidade.

Entende-se que ambas equações WLF e Arrhenius, conduzem a boas descrições dos dados gerando estimativas semelhantes. O uso da equação de Arrhenius gera menos esforço computacional, uma vez que ela contém um parâmetro a menos do que a equação WLF. Assim sendo, a equação de Arrhenius é mais indicada para simulações que envolvem métodos MCMC.

A verificação do modelo preditivo para os dois casos, com equação WLF e com equação de Arrhenius é semelhante. Em ambos os casos o modelo parece estar mal ajustado nas temperaturas mais extremas, quais sejam, -40°C e 50°C . No entanto, ao se realizar a análise da média dos valores preditos versus os dados observados, verifica-se, em cada caso, que o modelo se ajusta bem aos dados observados.

Também foi feita a abordagem via *bootstrap* bayesiano que gerou estimativas com intervalos de confiabilidade mais estreitos. Ou seja, quanto maior o

tamanho da amostra, maior o poder preditivo. Contudo, constata-se que o esforço computacional é bastante elevado. Salienta-se que tanto a verificação do modelo preditivo, acima comentada, quanto a aplicação da reamostragem, aqui tratada, ainda não haviam sido encontradas na estimação de parâmetros viscoelásticos por inferência bayesiana.

6.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Utilizar a abordagem bayesiana para estimar as propriedades dinâmicas ao cisalhamento de materiais viscoelásticos, considerando corpos de provas viscoelásticos e ensaios de transmissibilidade. Acredita-se que os dados experimentais assim obtidos serão ainda mais reveladores;
- Empregar a abordagem bayesiana na atualização de modelos em elementos finitos, relativos a sistemas mecânicos e estruturas contendo materiais ou dispositivos viscoelásticos;
- Aplicar os resultados de caracterização dinâmica via inferência bayesiana em projetos de dispositivos viscoelásticos para controle de vibrações com vistas a uma melhor consideração das incertezas pertinentes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALVIN, K. F.; **Finite Element Model Update via Bayesian Estimation and Minimization of Dynamic Residuals**. A.I.A.A. Journal. Vol 35. pp. 879-886. 1997.
- BALBINO, F. O.; **Análise Estatística de Dados Experimentais na Caracterização Dinâmica de Materiais Viscoelásticos**. 2012. 113 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2012.
- BAGLEY, R. L. AND TORVIK P. J.; **On the Fractional Calculus Model of Viscoelastic Behavior**. Journal of Rheology. Vol 30. pp. 133-156. 1986.
- BARNETT, V.; **Comparative Statistical Inference**. 3. ed. John Wiley & Sons. 1999.
- BAYES, T.; PRICE, R.; **An Essay Towards Solving a Problem in the Doctrine of Chances. By the late Rev. Mr. Bayes, communicated by Mr. Price, in a letter to John Canton, A.M.F.R.S.** Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Vol 53. pp. 370-418. 1763.
- BECK, J. L. AND KATAFYGIOTIS, L. S.; **Updating Models And Their Uncertainties. I: Bayesian Statistical Framework**. Journal of Engineering Mechanics. Vol 124. pp. 455-461. 1998.
- BECK, J. L. AND AU, S. K.; **Bayesian Updating of Structural Models and Reliability Using Markov Chain Monte Carlo Simulation**. Journal of Engineering Mechanics. pp. 380-391. 2002.
- BELDICA, C.E.; HILTON, H.H.; **Analytical and Computational Simulations of Experimental Determinations of Deterministic and Random Linear Viscoelastic Constitutive Relations**. Submetido ao Journal of Sandwich Structures and Materials. 1999. Disponível em <<http://csm.ncsa.illinois.edu/publications/1999/JSSM-experimental.pdf>>. Acessado em 30 de janeiro de 2013.
- BERGER, J. O.; WOLPERT, R. L.; **The Likelihood Principle**. 2. ed. Institute of Mathematical Statistics. 1988. Disponível em: <<http://projecteuclid.org/euclid.lnms/1215466210>>. Acessado em 15 de fevereiro de 2013.
- BIRNABAUM, A.; **On the Foundations of Statistical Inference**. Journal of the American Statistical Association. Vol 57. No 4. pp. 269-306. 1962.
- BROOKS, S. P.; GELMAN, A.; **General Methods for Monitoring Convergence of Iterative Simulations**. Journal of Computational and Graphical Statistics. Vol 7. No 4. pp. 434-455. 1998.
- BROOKS, S. P.; GELMAN, A.; JONES, G. L.; MENG, X. L.; **Handbook of Markov Chain Monte Carlo**. Boston. Chapman & Hall. 2011.

CASELLA, G.; GEORGE, E. I.; **Explaining the Gibbs Sampler**. The American Statistician. Vol 46. No 3. pp. 167-174. 1992.

CHEUNG, S. H. AND BECK, J. L.; **Bayesian Model Updating Using Hybrid Monte Carlo Simulation with Application to Structural Dynamic Models with Many Uncertain Parameters**. Journal of Engineering Mechanics. Vol 135. pp. 243-255. 2009.

CHIB, S.; GREENBERG, E.; **Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm**. The American Statistician. Vol 49. No 4. pp. 327-335. 1995.

COX, D. R.; **Some Problems Connected with Statistical Inference**. The Annals of Mathematical Statistics. Vol 29. pp. 357-372. 1958.

COWLES, M. K.; CARLIN, B. P.; **Markov Chain Monte Carlo Convergences Diagnostics: A Comparative Review**. Journal of the American Statistical Association. Vol 91. No 434. pp. 883-904. 1996.

DANDEKAR, D. P.; GREEN, J. L.; HANKIN, M.; MARTIN, A. G.; WEISGERBER, W.; SWANSON, R.A.; **Deformation of Isodamp (A Polyvinyl Chloride-Based Elastomer) at Various Loading Rates**. Report No. MTL TR 91-16. U.S. Army Materials Technology Laboratory, MA, USA. 1991.

DAGHIA, F.; MIRANDA, S.; UBERTINI, F.; VIOLA, E.; **Estimation of Elastic Constants of Thick Laminated Plates within a Bayesian Framework**. Composite Structures. Vol 80. pp. 461-473. 2007.

E-A-R Speciality Composites. **Technical Data Sheet TDS-19- ISODAMP C-1000 Series Isolation Materials**. USA. 1996.

EFRON, B.; **Bootstrap Methods: Another Look at the Jackknife**. The Annals of Statistics. Vol 7. pp. 1-26. Jan, 1979.

EFRON, B.; & TIBSHIRANI, R. J.; **An Introduction to the Bootstrap**. New York. Chapman & Hall. 1993.

ESPÍNDOLA, J. J., SILVA NETO, J. M. E LOPES, E. M. O.; **On the Measurement of the Dynamic Properties of Viscoelastic Materials**. Anais do 2º Congresso Temático de Aplicações de Dinâmica e Controle (DINCON), Ed.: J. M. Balthazar et al, Vol. 2, São José dos Campos, Brasil. pp. 2452-2464. 2003.

ESPÍNDOLA, J.J.; LOPES; E.M.O.; SILVA NETO; J.M.; **A Generalized Fractional Derivative Approach to Viscoelastic Material Properties Measurement**. Applied Mathematics and Computation. Vol. 164. pp. 493-506. 2005.

ESPÍNDOLA, J. J.; BAVASTRI, C. A.; LOPES, E.M.O.; **Design of Optimum Systems of Viscoelastic Vibration Absorbers for a Given Material Based on the Fractional Calculus Model**. Journal of Vibration and Control. Vol. 14. pp. 1607-1630. 2008.

FERRY, J. D.; FITZGERALD, E. R.; GRANDINE, L. D. JR.; WILLIAMS, M. L.; **Temperature Dependence of Dynamic Properties of Elastomers; Relaxation Distributions**. Industrial and Engineering Chemistry. Vol. 44. pp. 703-706. 1952.

FERRY, J.D.; **Viscoelastic Properties of Polymers**. 3 ed. John Wiley & Sons. 1980.

FINDLEY, W. N.; LAI, J. S.; ONARAN, K.; **Creep and Relaxation of Nonlinear Viscoelastic Materials**. North Holland Publishing Company. 1976.

GAMERMAN, D.; LOPES, H. F.; **Markov Chain Monte Carlo**. 2 ed. Boca Raton. Chapman & Hall. 2006.

GELFAND, A. E.; SMITH, A. F. M.; **Sampling-Based Approaches to Calculating Marginal Densities**. Journal of the American Statistical Association. Vol 85. No 410. pp. 398-409. 1990.

GELMAN, A.; **Bayesian Formulation of Exploratory Data Analysis and Goodness-of-fit Testing**. International Statistical Review. Vol 71. No 2. pp. 369-382. 2003.

GELMAN, A.; Complex Number in JAGS [mensagem pessoal]. Mensagem recebida de <gelman@stat.columbia.edu> em 13 de março de 2015.

GELMAN, A.; CARLIN, J. B.; STERN, H. S.; RUBIN, D. B.; **Bayesian Data Analysis**. 2 ed. Chapman & Hall. 2004.

GELMAN, A.; RUBIN, D. B.; **Inference from Iterative Simulation Using Multiple Sequences**. Statistical Science. Vol 7. No 4. pp. 457-511. 1992.

GEMAN, S.; GEMAN, D.; **Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images**. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. Vol 6. pp. 721-741. 1984.

GENT, A.N.; **Engineering with Rubber: How to Design Rubber Components**. 2 ed. Munich: Hanser. 2001.

GIERE, R. N.; **Explaining Science: A Cognitive Approach**. Chicago. University of Chicago Press. 1988.

GILL, J.; **Bayesian Methods. A Social and Behavioral Sciences Approach**. 2 ed. New York. CRC Press. 2009.

GNATOWSKI, A.; KOSZKUL, J.; **Investigation on PA/PP Mixture Properties by Means of DMTA Method**. Journal of Materials Processing Technology. Vol. 175. pp. 212–217. 2006.

GOGU, C.; **Facilitating Bayesian Identification of Elastic Constants through Dimensionality Reduction and Response Surface Methodology**. 2009. 233f. Tese de doutorado. Universidade da Flórida. 2009.

GOGU, C.; HAFTKA, R.; RICHE, R.; MOLIMARD, L.; VAUTRIN, A.; **Introduction to the Bayesian Approach Applied to Elastic Constant Identification**. AIAA Journal. Vol 48. No 5. pp. 893-903. 2010.

GOGU, C.; YIN, W.; HAFTKA, R.; IFJU, P.; MOLIMARD, L.; RICHE, R.; VAUTRIN, A.; **Bayesian Identification of Elastic Constants in Multi-Directional Laminate from Moiré Interferometry Displacement Fields**. Experimental Mechanics. Vol 53. pp. 635-648. 2013.

HASTINGS, W. K.; **Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications**. Biometrika. Vol 57. No 1. pp. 97-109. 1970.

HERNANDEZ W. P.; BORGES F. C. L.; CASTELLO D. A.; ROITMAN N.; MAGLUTA C.; **Bayesian Inference Applied on Model Calibration of a Fractional Derivative Viscoelastic Model**. Proceedings of the XVII International Symposium on Dynamic Problems of Mechanics. Natal, RN. Brasil. Fevereiro de 2015.

HONGXING, H.; SOL, H.; WILDE, W. P.; **On a Statistical Optimization Method Used in Finite Element Model Updating**. Journal of Sound and Vibration. Vol 231. pp. 1071-1078. 2000.

INSTITUTO Nacional de Meteorologia. Acesso ao Banco de Dados Meteorológicos para Ensino e Pesquisa. Disponível em: <<http://www.inmet.gov.br/portal/index.php?r=bdmep/bdmep>>. Acessado em 27 de junho de 2014.

JONES, D. I. G.; **A Reduced-Temperature Nomogram for Characterization of Damping Material Behavior**. Shock and Vibration Bulletin. Vol. 48, No. 2. pp. 13-22. 1978.

JONES, D. I. G.; **On Temperature-Frequency Analysis of Polymer Dynamic Mechanical Behavior**. Journal of Sound and Vibration. Vol. 140. pp. 85-102. 1990.

JONES, D.I.G.; **Results of a Round Robin Test Program: Complex Modulus Properties of a Polymeric Damping Material**. Final Report for Period Oct 1986-May 1992. WL-TR-92-3104, Wright Laboratory, Flight Dynamics Directorate, Structural Dynamics Branch, Wright-Patterson AFB, Ohio, USA. 1992.

JONES, D.I.G.; **Handbook of Viscoelastic Vibration Damping**. John Wiley & Sons. 2001.

KASS, R.E.; WASSERMAN, L.; **The Selection of Prior Distributions by Formal Rules**. Journal of the American Statistical Association. Vol 91. pp. 1343-1370. 1996.

KATAFYGIOTIS, L. S.; YUEN, K.; **Bayesian Spectral Density Approach for Modal Updating Using Ambient Data**. Earthquake Engineering and Structural Dynamics. Vol 30. pp. 1103-1123. 2001.

KERSCHEN, G.; GOLINVAL, J. C.; HEMEZ, F. M.; **Bayesian Model Screening for the Identification of Nonlinear Mechanical Structures**. Journal of Vibration and Acoustics. Vol 125. pp. 389-397. 2003.

KRUSCHKE, J. K.; **Doing Bayesian Data Analysis: A Tutorial with R, JAGS, and Stan**. 2 ed. Elsevier. 2015.

LAI, T. C. AND IP, K. H.; **Parameter Estimation of Orthotropic Plates by Bayesian Sensitivity Analysis**. Composite Structures. Vol 34. pp. 29-42. 1996.

LEWIS, T.; NASHIF, A. D.; JONES, D. I. G.; **Frequency Temperature Dependence of Polymer Complex Modulus Properties**. Proceedings of the Damping 1989 Conference. West Palm Beach. Vol 2. No 4. Feb. 1989.

LAKES, R.S.; **Viscoelastic Solids**. CRC Press. 1999.

LINK, W. A.; EATON, J. M.; **On Thinning of Chains in MCMC**. Methods in Ecology and Evolution. No 3. pp. 112-115. 2012.

LOPES, E.M.O.; **On the Experimental Response Reanalysis of Structures with Elastomeric Materials**. Tese de doutorado. (PhD Mechanical Engineering) Universidade de Wales, Cardiff, 1998.

MAHATA, K.; SÖDERSTRÖM, T.; **Bayesian Approaches for Identification of The Complex Modulus of Viscoelastic Materials**. Automatica. Vol 43. pp. 1369-1376. 2007.

MARWALA, T.; MDLAZI, L.; SIBISI, S.; **Finite Element Model Updating Bayesian Approach**. Conference and Exposition on Structural Dynamics, Structural Health Monitoring. New York. 2005.

MEAD, D. J.; **Passive Vibration Control**. John Wiley & Sons. 1999.

MEDEIROS JÚNIOR, W. B.; **Caracterização Dinâmica de Elastômeros via Derivadas Fracionárias e Método GHM**. 2010. 173 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2010.

METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A.H.; TELLER, E.; **Equation of State Calculations by Fast Computing Machines**. The Journal of Chemical Physics. Vol 21. pp. 1087-1092. 1953.

MIGON, H. S.; GAMERMAN, D.; LOUZADA, F.; **Statistical Inference: An Integrated Approach**. 2 ed. CRC Press. 2015.

MOTT, P. H.; DORGAN, J. R.; ROLAND, C. M.; **The Bulk Modulus and Poisson's Ratio of "Incompressible" Materials**. Journal of Sound and Vibration. Vol 312. pp. 572-575. 2008.

NAGEL, J. AND SUDRET, B.; **Probabilistic Inversion for Estimating the Variability of Material Properties: A Bayesian Multilevel Approach**. Proceedings of the 11th International Probabilistic Workshop. Brno, Czech Republic. 2013.

NASHIF, A. D.; JONES, D.I.G.; HENDERSON, J.P.; **Vibration Damping**. John Willey & Sons. 1985.

NETZSCH, Dynamic Mechanical Analyzer, DMA 242C, **Instruction Manual**. 1994

OATES, W. S.; HAYS, M.; MILES, P.; SMITH, R.; **Uncertainty Quantification and Stochastic-based Viscoelastic Modeling of Finite Deformation Elastomers**. Electroactive Polymer Actuators and Devices. Vol 8687. doi: 10.1117/12.2009706. 2013.

PAULINO, C. D.; TURKMAN, M. A. A.; MURTEIRA, B.; **Estatística Bayesiana**. Fundação Calouste Gulbenkian. Lisboa. 2003.

PLUMMER, M.; **rjags: Bayesian Graphical Models Using MCMC**. R package version 3-14. <<https://cran.r-project.org/web/packages/rjags/rjags.pdf>>. 2014.

PRESS, J.S.; **Subjective and Objective Bayesian Statistics: Principles, Models and Applications**. 2. ed. John Willey & Sons. New Jersey. 2003.

PRITZ, T.; **Analysis of Four-Parameter Fractional Derivative Model of Real Solid Materials**. Journal of Sound and Vibration. Vol 195. pp. 103-115. 1996.

PRITZ, T; **Frequency Dependences of Complex Moduli and Complex Poisson's Ratio of Real Solid Materials**. Journal of Sound and Vibration. Vol 214. pp. 83-104. 1998.

PRITZ, T; **Measurement Methods of Complex Poisson's Ratio of Viscoelastic Materials**. Applied Acoustics. Vol. 60. pp. 279-292. 2000.

PRITZ, T; **Loss Factor Peak of Viscoelastic Materials: Magnitude to Width Relations**. Journal of Sound and Vibration. Vol. 246. pp. 265-280. 2001.

PRITZ, T; **The Poisson's Loss Factor of Solid Viscoelastic Materials**. Journal of Sound and Vibration. Vol 306. pp. 790-802. 2007.

QUENOUILLE, M.; **Approximate Tests of Correlation in Time Series**. Journal of the Royal Statistical Society. Series B. Vol. 11. pp. 18-84. 1949.

REBBA, R.; MAHADEVAN, S.; HUANG, S.; **Validation and Error Estimation of Computational Models**. Reliability Engineering and System Safety. Vol 91. pp. 1390-1397. 2006.

ROBERT, C. P.; **The Bayesian Choice: From Decision-Theoretic Foundations to Computational Implementation**. 2. ed. Springer. 2007.

ROSSI, P. E.; ALLENBY, G. M.; MCCULLOCH, R.; **Bayesian Statistics and Marketing**. John Wiley & Sons. 2005

RUBIN, D. B.; **The Bayesian Bootstrap**. The Annals of Statistics. Vol 9. No 1. pp. 130-134. 1981.

SILVA, N. M.; LIMA, L. F. C. P.; FARIA, R. N.; ROSSI, J. L.; **Influência da Pós-cura na Temperatura de Transição Vítrea em Compósitos de Fibra de Carbono e de Poliamida com Matriz de Polímero Termofixo**. 17º CBECIMat - Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais. Foz do Iguaçu. 2006.

SIMON, P.; LAPLACE, M.; **A Philosophical Essay on Probabilities**. Tradução da sexta edição. New York. Dover Publications. 1951.

SNOWDON, J.C.; **Vibration and Shock in Damped Mechanical Systems**. John Wiley & Sons. 1968.

SU, Y.S.; YAJIMA, M.; **R2jags: A Package for Running jags from R**. R package version 05-7. <<https://cran.r-project.org/web/packages/R2jags/R2jags.pdf>>. 2015.

SZABO, J.P.; KEOUGH, I.A.; **Method for Analysis of Dynamic Mechanical Thermal Analysis Data Using the Havriliak-Negami Model**. Thermochemica Acta. Vol 1-12. pp. 392-393. 2002.

TANNER, M. A.; **Tools for Statistical Inference: Methods for the Exploration of Posterior Distribution and Likelihood Functions**. 3. ed. Evanston. Springer. 2006.

TENG, T.; HU, N.; **Analysis of Damping Characteristics for Viscoelastic Laminated Beams**. Computational Methods Applied Mechanical Engineering. Vol. 190. pp. 3881-3892. 2001.

TIERNEY, L.; **Markov Chains for Exploring Posterior Distributions**. The Annals of Statistics. Vol 22. No 4. pp. 1701-1728. 1994.

TSCHOEGL, N. W.; KNAUSS, W. G.; EMRI, I.; **Poisson's Ratio in Linear Viscoelasticity - A Critical Review**. Mechanics of Time-Dependent Materials. Vol 6. pp. 3-51. 2002.

WASSERMAN, L.; **All of Statistics: A Concise Course in Statistical Inference**. Springer. 2004.

WILLIAMS, M. L.; LANDEL, R. F.; FERRY, J. D.; **The Temperature Dependence of Relaxation Mechanisms in Amorphous Polymers and Others Glass-forming Liquids**. Journal of the American Chemical Society. Vol 77. pp. 3701-3707. 1955.

YUEN, K. V.; BECK, J. L.; **Updating Properties of Nonlinear Dynamical Systems with Uncertain Unput**. Journal of Engineering Mechanics. Vol 129. pp. 9-20. 2003.

ZHANG, E. L.; FEISSEL, P.; ANTONI, J.; **A Comprehensive Bayesian Approach for Model Updating and Quantification of Modeling Errors.** Probabilistic Engineering Mechanics. Vol 26. pp. 550-560. 2011.

ZHANG, E.; CHAZOT, J. D.; ANTONI, J.; HAMDI, M.; **Bayesian Characterization of Young`s Modulus of Viscoelastic Materials in Laminated Structures.** Journal of Sound and Vibration. Vol 332. pp. 3654-3666. 2013.

APÊNDICE A – PROGRAMA COMPUTACIONAL RELATIVO AO MODELO BAYESIANO COM EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

```
# carregando os pacotes e funções
require(rjags)
require(ggplot2)
require(gridExtra)
require(plyr)
require(reshape)
require(reshape2)
source('../Rfunctions/DBDA2E-adapted.R')

#-----
# STEP 1 - Inferencia Bayesiana para os dados
#-----

modelo = "modelo_bayesiano_moduloelasticidade_Arrhenius.txt"

modelstring = "
model{
for( r in 1 : Ndata ) {
y1[r] ~ dnorm(logRe[r],1/(sigma2Real))
y2[r] ~ dnorm(logIm[r],1/(sigma2Imag))
y3[r] ~ dnorm(mu[r],1/sigma2)
alphan[r] <- 10 ^((TA/TP[r])-(TA/273)) ##### (Aqui neste comando pode-se modificar a entrada da
equação de Arrhenius para a equação WLF)
omegaBeta[r]<-(alphan[r]*2*3.141593*om[r])^beta
Re[r]<-
(Eh*(b*omegaBeta[r])^2+(Eh+EI)*cos(beta*3.141593/2)*b*(omegaBeta[r]+EI)/((b*omegaBeta[r])^2+2*
cos(beta*3.141593/2)*b*omegaBeta[r]+1))
Im[r]<-
(Eh)*sin(beta*3.141593/2)*b*(omegaBeta[r])/((b*omegaBeta[r])^2+2*cos(beta*3.141593/2)*b*omegaB
eta[r]+1)-
((EI)*sin(beta*3.141593/2)*b*(omegaBeta[r])/((b*omegaBeta[r])^2+2*cos(beta*3.141593/2)*b*omegaB
eta[r]+1))
logRe[r]<-log(Re[r])
logIm[r]<-log(Im[r])
mu[r]<-log(sqrt(Re[r]^2+Im[r]^2))
}

sigma2Real~dgamma(1,1)
sigma2Imag~dgamma(1,1)
sigma2~dgamma(1,1)
TA~dnorm(8000,1/1000000)
EI ~ dnorm(5,1/1000000)T(0,10)
Eh ~ dnorm(2395,1/1000000)
b ~ dlnorm(0.004,1/1000000)
beta ~ dnorm(0.4,1/1000000)T(0,1)
}
" # close quote for modelstring

writeLines(modelstring,con="modelo_bayesiano_moduloelasticidade_Arrhenius.txt")

# lendo os dados
Dados<-read.csv('dados_experimento.csv')
```

```

# salvando os dados
dataMat<-Dados
# extraindo o número de observações
Ndata = NROW(dataMat)
## Media dos dados
meanMat<-
ddply(dataMat,.(Freq,Temp),summarise,module.mean=mean(module),mimaginario.mean=mean(mima
ginario))
# # Extract data info:
Nmean = NROW(meanMat)
# # Data List
# # Specify data, as a list.
dataList = list(Ndata = Ndata ,om = dataMat$Freq,Tp =
dataMat$Temp,y1=log(dataMat$modulo),y2=log(dataMat$mimaginario),y3=log(sqrt(dataMat$mimagin
ario^2+dataMat$modulo^2)))
#-----
# INITIALIZE THE CHAINS.
TA=8000;El= 5;Eh = 2395;b = 0.004;beta = 0.4;sigma2= 1;sigma2Real=1;sigma2Imag=1
initsList = list( TA = TA, El = El, Eh = Eh, b = b, beta = beta , sigma2 = sigma2,sigma2Real =
sigma2Real,sigma2Imag = sigma2Imag)
#-----
# RUN THE CHAINS
parameters = c("TA", "El", "Eh", "b", "beta", "sigma2", "sigma2Real", "sigma2Imag")
adaptSteps = 1          # Number of steps to "tune" the samplers.
burnInSteps = 1000      # Number of steps to "burn-in" the samplers.
nChains = 3             # Number of chains to run.
numSavedSteps=100000    # Total number of steps in chains to save.
thinSteps=1             # Number of steps to "thin" (1=keep every step).
nPerChain = ceiling( ( numSavedSteps * thinSteps ) / nChains ) # Steps per chain.
# Create, initialize, and adapt the model:
jagsModel = jags.model("modelo_bayesiano_moduloelasticidade_Arrhenius.txt",data=dataList ,
inits=initsList , n.chains=nChains , n.adapt=adaptSteps )
# Burn-in:
cat( "Burning in the MCMC chain...\n" )
update( jagsModel , n.iter=burnInSteps )
# The saved MCMC chain:
cat( "Sampling final MCMC chain...\n" )
codaSamples = coda.samples( jagsModel , variable.names=parameters ,n.iter=nPerChain ,
thin=thinSteps )
# salvando os parâmetros
Parametros = as.matrix( codaSamples )
#-----
# Distribuicoes a Posteriori

TA = (Parametros[, 'TA'])
El = (Parametros[, 'El'])
Eh = (Parametros[, 'Eh'])
b = (Parametros[, 'b'])
beta = Parametros[, 'beta']
sigma2 = (Parametros[, 'sigma2'])
sigma2Real = (Parametros[, 'sigma2Real'])
sigma2Imag = (Parametros[, 'sigma2Imag'])

save(Dados,dataList,Parametros,codaSamples,file='codasamples_modelo_imaginario_Arrhenius_10.
Rda')
#-----
# FIM Step 1
#-----

```

```

# lendo os dados para fazer a analise
load('codasamples_modelo_moduloelasticidade_Arrhenius.Rda')
#-----
# Plot Posteriori para os Parâmetros
#-----
pdf('figs/diretorio/plotPost_TA.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'TA'], cenTend='mean')
dev.off()
pdf('figs/diretorio/plotPost_EI.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'EI'], cenTend='mean')
dev.off()
pdf('figs/diretorio/plotPost_Eh.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'Eh'], cenTend='mean')
dev.off()
pdf('figs/diretorio/plotPost_b.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'b'], cenTend='mean')
dev.off()
pdf('figs/diretorio/plotPost_beta.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'beta'], cenTend='mean')
dev.off()
pdf('figs/diretorio/plotPost_sigma2.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'sigma2'], cenTend='mean')
dev.off()
pdf('figs/diretorio/plotPost_sigma2Real.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'sigma2Real'], cenTend='mean')
pdf('figs/diretorio/plotPost_sigma2Imag.pdf')
plotPost.PT(Parametros[, 'sigma2Imag'], cenTend='mean')
dev.off()

diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='EI', saveName='figs/diretorio/diagEI' ,
saveType="jpg")
diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='Eh', saveName='figs/diretorio/diagEh' ,
saveType="jpg")
diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='b', saveName='figs/diretorio/diagb' ,
saveType="jpg")
diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='beta', saveName='figs/diretorio/diagbeta' ,
saveType="jpg")
diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='TA', saveName='figs/diretorio/diagTA' ,
saveType="jpg")
diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='sigma2', saveName='figs/diretorio/diagsigma2' ,
saveType="jpg")
diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='sigma2Real', saveName='figs/diretorio/diagsigma2Real0' , saveType="jpg")
diagMCMC(codaObject = codaSamples , parName='sigma2Imag', saveName='figs/diretorio/diagsigma2Imag' , saveType="jpg")
graphics.off()

## --- Posterior Predictive Check ---

sample.Param = Parametros[,c('TA','EI','Eh','b','beta','sigma2','sigma2Real','sigma2Imag')]
predModulo<-function(om,Tp,param){

  param = as.vector(param)

  TA = param[1]
  EI = param[2]
  Eh = param[3]

```

```

b = param[4]
beta = param[5]
sigma2 = param[6]
sigma2Real = param[7]
sigma2Imag = param[8]

  alphas <- 10 ^ ((TA/Tp)-(TA/273))
  omegaBeta <- (alphas^2 * 3.141593 * om)^beta
  Real <-
  ((Eh * (b * omegaBeta)^2 + (Eh + El) * cos(beta * 3.141593/2) * b * (omegaBeta) + El) / ((b * omegaBeta)^2 + 2 * cos(beta * 3.141593/2) * b * omegaBeta + 1))
  Imag <-
  (((Eh) * sin(beta * 3.141593/2) * b * (omegaBeta)) / ((b * omegaBeta)^2 + 2 * cos(beta * 3.141593/2) * b * omegaBeta + 1)) -
  ((El) * sin(beta * 3.141593/2) * b * (omegaBeta)) / ((b * omegaBeta)^2 + 2 * cos(beta * 3.141593/2) * b * omegaBeta + 1))
  mu <- log(sqrt(Real^2 + Imag^2))

  # tetaE
  tetaE = atan(Imag/Real)

  # variancia do log da soma quadratica dos dos modulos real e imaginario
  sigma <- sqrt(sigma2)
  # valor predito para o log da soma quadratica dos modulos real e imaginario
  ruidoS <- rnorm(1, 0, sigma)
  y.pred <- mu + ruidoS
  # valor predito para o modulo real
  #real.pred <- log(exp(y.pred) * cos(tetaE))
  real.pred <- log(Real) + rnorm(1, 0, sqrt(sigma2Real))
  # valor predito para o modulo imaginario
  #imag.pred <- log(exp(y.pred) * sin(tetaE))
  imag.pred <- log(Imag) + rnorm(1, 0, sqrt(sigma2Imag))
  return(list(y.pred = y.pred, mu = mu,
             real.pred = real.pred, mu.real = Real,
             imag.pred = imag.pred, mu.imag = Imag,
             ruidoS = ruidoS,
             om = om, Tp = Tp)
  )
}

# uma função para previsão da soma, módulos real e imaginário.
matrizPred <- function(idx, jdx){
  mpred = unlist(predModulo(om = dataList$om[idx], Tp = dataList$Tp[idx], param = sample.Param[jdx,]))
  return(mpred = mpred)
}

# esta parte do código simula os módulos com base em amostras dos parâmetros da distribuição a posteriori
IDX = 1:dataList$Ndata
JDX = sample(1:dim(Parametros)[1], 2000)
INDx = expand.grid(IDX, JDX)
Mx <- t(mapply(matrizPred, INDx[,1], INDx[,2]))
Mx <- as.data.frame(Mx)

# criação de arquivos com o resumo das simulações a partir de amostras da posteriori
Soma.Mx <- ddply(Mx, .(om, Tp), summarize, mean.pred = mean(y.pred), q025.pred = quantile(y.pred, 0.025), q975.pred = quantile(y.pred, 0.975))

```

```

Real.Mx<-ddply(Mx,.(om,Tp),summarize,mean.pred=mean(real.pred),q025.pred=
quantile(real.pred,0.025),q975.pred=quantile(real.pred,0.975))
Imag.Mx<-ddply(Mx,.(om,Tp),summarize,mean.pred=mean(imag.pred),q025.pred=
quantile(imag.pred,0.025),q975.pred=quantile(imag.pred,0.975))

# resumindo os dados para a soma
Data.obs=cbind.data.frame(Y=dataList$y3,Tp=dataList$Tp,om=dataList$om)
Soma.OB<-ddply(Data.obs,.(om,Tp),summarize,mean.obs=mean(Y))
Soma.Summary.Pred=merge(Data.obs,Soma.Mx,key=c('om','Tp'))
Soma.Summary.Pred=merge(Soma.Summary.Pred,Soma.OB,key=c('om','Tp'))

# resumindo os dados para o modulo real
Data.obs=cbind.data.frame(Y=dataList$y1,Tp=dataList$Tp,om=dataList$om)
Soma.OB<-ddply(Data.obs,.(om,Tp),summarize,mean.obs=mean(Y))
Real.Summary.Pred=merge(Data.obs,Real.Mx,key=c('om','Tp'))
Real.Summary.Pred=merge(Real.Summary.Pred,Soma.OB,key=c('om','Tp'))

# resumindo os dados para o modulo imaginário
Data.obs=cbind.data.frame(Y=dataList$y2,Tp=dataList$Tp,om=dataList$om)
Soma.OB<-ddply(Data.obs,.(om,Tp),summarize,mean.obs=mean(Y))
Imag.Summary.Pred=merge(Data.obs,Imag.Mx,key=c('om','Tp'))
Imag.Summary.Pred=merge(Imag.Summary.Pred,Soma.OB,key=c('om','Tp'))

myData=cbind.data.frame(Temperatura=dataList$Tp,Frequencia=dataList$om,
                        Real=dataList$y1,Imag=dataList$y2)

myData$Frequencia<-mapvalues(myData$Frequencia,from=c(0.1,0.2,0.5,1,2,5,10,20,50,100),
                             to=c(rep('0.1-0.5',3),rep('1-5',3),10,20,rep('50-100',2)))

gx<-ggplot(myData,aes(x=Real,y=Imag))+
  geom_point(aes(colour=factor(Temperatura), shape = factor(Frequencia)))
ggsave(gx,filename
'figs/imaginario_10/ModuloReal_vs_ModuloImaginario_Temperatura_Frequencia.pdf',width=8,height =
6)

# gráfico dos desvios
pdf('figs/imaginario_10/ModuloReal_vs_ModuloImaginario.pdf')
plot(dataList$y1,dataList$y2,
      xlab = 'Módulo real (log)',
      ylab = 'Módulo Imaginario (log)',
      main = 'Módulos Real e Imaginário Observados')
dev.off()

# gráfico dos desvios
pdf('figs/imaginario_10/Observado_vs_Predito_Soma.pdf')
plot(Soma.Summary.Pred$mean.obs,Soma.Summary.Pred$mean.pred,
      xlab = 'Observados (log)',
      ylab = 'Preditos (log)',
      main = 'Raiz da Soma Quadrática dos Módulos')
abline(a=0,b=1,col='red')
dev.off()

# gráfico dos desvios
pdf('figs/imaginario_10/Observado_vs_Predito_Real.pdf')
plot(Real.Summary.Pred$mean.obs,Real.Summary.Pred$mean.pred,
      xlab = 'Observados (log)',
      ylab = 'Preditos (log)',
      main = 'Módulo Real')
abline(a=0,b=1,col='red')

```

```

dev.off()

# gráfico dos desvios
pdf('figs/imaginario_10/Observado_vs_Predito_Imaginario.pdf')
plot(Imag.Summary.Pred$mean.obs,Imag.Summary.Pred$mean.pred,
     xlab = 'Observados (log)',
     ylab = 'Preditos (log)',
     main = 'Módulo Imaginario')
abline(a=0,b=1,col='red')
dev.off()

#### Gráfico por temperaturas

doTemperatureLog<-function(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=273,typeData='Real'){

  # cria o arquivo para o gráfico
  sp<-subset(Summ.data,Tp==tp,select=c('Y','mean.pred','om','q025.pred','q975.pred','mean.obs'))
  sp.rs<-melt(sp,id='om')
  sp.rs$variable<-mapvalues(sp.rs$variable,from=c('Y','mean.pred','q025.pred','q975.pred','mean.obs'),
                           to=c('Observado','Predito','Q025 Predito','Q975 Predito','Media Observado')
                           )
  sp.rs<-sp.rs[!duplicated(sp.rs),]

  if(typeData=='Real'){ylab = 'Modulo Real (log)'}
  }else if(typeData=='Imag'){
    ylab = 'Modulo Imaginario (log)'}else if(typeData=='Soma'){
    ylab = 'Soma (log)'}

  # produz o gráfico
  gx<-ggplot(data=sp.rs,aes(x=om,y=value,colour=variable))+
    guides(colour=FALSE)+
    geom_point()+
    geom_line(data=sp.rs[sp.rs$variable!='Observado'],aes(linetype=variable))+
    scale_linetype_manual(values = c(2,3,3,1))+
    scale_color_manual(values=c('blue','black','black','black','red'))+
    scale_x_log10()+
    #scale_y_log10()+
    labs(x='Freq. (log)', y = ylab , title = paste('Temperatura ',tp,sep=''))+
    theme_bw()

  fn = paste0('figs/imaginario_10/modulo_',paste(typeData,tp,sep='_'),'_.pdf')
  ggsave(gx,file=fn,width=7,height=4.8)

}

#### fazendo o gráfico para cada temperatura
doTemperatureLog(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=233,typeData = 'Real')
doTemperatureLog(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=253,typeData = 'Real')
doTemperatureLog(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=263,typeData = 'Real')
doTemperatureLog(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=273,typeData = 'Real')
doTemperatureLog(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=283,typeData = 'Real')
doTemperatureLog(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=293,typeData = 'Real')
doTemperatureLog(Summ.data=Real.Summary.Pred,tp=323,typeData = 'Real')

doTemperatureLog(Summ.data=Imag.Summary.Pred,tp=233,typeData = 'Imag')
doTemperatureLog(Summ.data=Imag.Summary.Pred,tp=253,typeData = 'Imag')
doTemperatureLog(Summ.data=Imag.Summary.Pred,tp=263,typeData = 'Imag')
doTemperatureLog(Summ.data=Imag.Summary.Pred,tp=273,typeData = 'Imag')

```



```
doTemperatureLog(Summ.data=Imag.Summary.Pred,tp=283,typeData = 'Imag')
doTemperatureLog(Summ.data=Imag.Summary.Pred,tp=293,typeData = 'Imag')
doTemperatureLog(Summ.data=Imag.Summary.Pred,tp=323,typeData = 'Imag')
```

```
doTemperatureLog(Summ.data=Soma.Summary.Pred,tp=233,typeData = 'Soma')
doTemperatureLog(Summ.data=Soma.Summary.Pred,tp=253,typeData = 'Soma')
doTemperatureLog(Summ.data=Soma.Summary.Pred,tp=263,typeData = 'Soma')
doTemperatureLog(Summ.data=Soma.Summary.Pred,tp=273,typeData = 'Soma')
doTemperatureLog(Summ.data=Soma.Summary.Pred,tp=283,typeData = 'Soma')
doTemperatureLog(Summ.data=Soma.Summary.Pred,tp=293,typeData = 'Soma')
doTemperatureLog(Summ.data=Soma.Summary.Pred,tp=323,typeData = 'Soma')
```

```
#-----
# Bootstrap Bayesiano
#-----
```

```
# Esta função realiza a reamostragem bayesiana, utilizando (re)amostras de tamanho 40
```

```
reamostragem<-function(D=Dados,nresample=40){

  val.freq<-levels(D$freq)
  val.temp<-levels(D$temp)

  resample.df<-NULL

  for (i in 1:length(val.freq)){

    for (j in 1:length(val.temp)){

      D.sub = subset(D,freq==val.freq[i] & temp==val.temp[j])

      vec.unif<-diff(c(0,sort(runif((dim(D.sub)[1]-1),0,1)),1))
      g.unif<-vec.unif

      real<-sample(sort(D.sub$modulo),nresample,prob=g.unif,replace=TRUE)
      imag<-sample(sort(D.sub$mimaginario),nresample,prob=g.unif,replace=TRUE)

      resample.df<-rbind.data.frame(resample.df,cbind.data.frame(modulo      =      real,
mimaginario=imag,Temp=D.sub$Temp[1],Freq=D.sub$Freq[1]))

    }
  }

  return(resample.df)
}
```

```
Parametros<-NULL
```

```
# Este loop realiza 20x uma reamostragem de tamanho 40
```

```
for (k in 1:20){
  # lendo os dados
  Dados<-read.csv('dados_experimento.csv')

  Dados<-reamostragem()
  #Dados<-subset(Dados,!((Temp ==233 & Freq%in%c(20,50,100)) |(Temp ==323 & Freq
%in%c(20,50,100))) )
```

```

## Reading data
dataMat<-Dados

## Extract data info:
Ndata = NROW(dataMat)

## Media dos dados
meanMat<-
ddply(dataMat,.(Freq,Temp),summarise,module.mean=mean(module),mimaginario.mean=mean(mima
ginario))

## Extract data info:
Nmean = NROW(meanMat)

## Data List
## Specify data, as a list.
dataList = list(Ndata = Ndata ,om = dataMat$Freq,Tp =
dataMat$Temp,y1=log(dataMat$modulo),y2=log(dataMat$mimaginario),y3=log(sqrt(dataMat$mimagin
ario^2+dataMat$modulo^2)))
#-----
# INITIALIZE THE CHAINS.
TA=8000;EI= 5;Eh = 2395;b = 0.004;beta = 0.4;sigma2= 1;sigma2Real=1;sigma2Imag=1
initsList = list( TA = TA, EI = EI, Eh = Eh, b = b, beta = beta , sigma2 = sigma2,sigma2Real =
sigma2Real,sigma2Imag = sigma2Imag)

#-----
# RUN THE CHAINS

parameters = c("TA", "EI", "Eh", "b", "beta", "sigma2", "sigma2Real", "sigma2Imag")
adaptSteps = 1 # Number of steps to "tune" the samplers.
burnInSteps = 5000 # Number of steps to "burn-in" the samplers.
nChains = 3 # Number of chains to run.
numSavedSteps=100000 # Total number of steps in chains to save.
thinSteps=1 # Number of steps to "thin" (1=keep every step).
nPerChain = ceiling( ( numSavedSteps * thinSteps ) / nChains ) # Steps per chain.
# Create, initialize, and adapt the model:
jagsModel =
jags.model("../Arrhenius/modelo_bayesiano_modeuloelasticidade_Arrhenius.txt",data=dataList ,
inits=initsList ,n.chains=nChains , n.adapt=adaptSteps )

# Burn-in:
cat( "Burning in the MCMC chain...\n" )
update( jagsModel , n.iter=burnInSteps )
# The saved MCMC chain:
cat( "Sampling final MCMC chain...\n" )
codaSamples = coda.samples( jagsModel , variable.names=parameters , n.iter=nPerChain ,
thin=thinSteps )

# salvando os parâmetros
param = as.matrix( codaSamples )

Parametros = rbind(Parametros,cbind(param,k))

Dados<-read.csv('dados_experimento.csv')

```

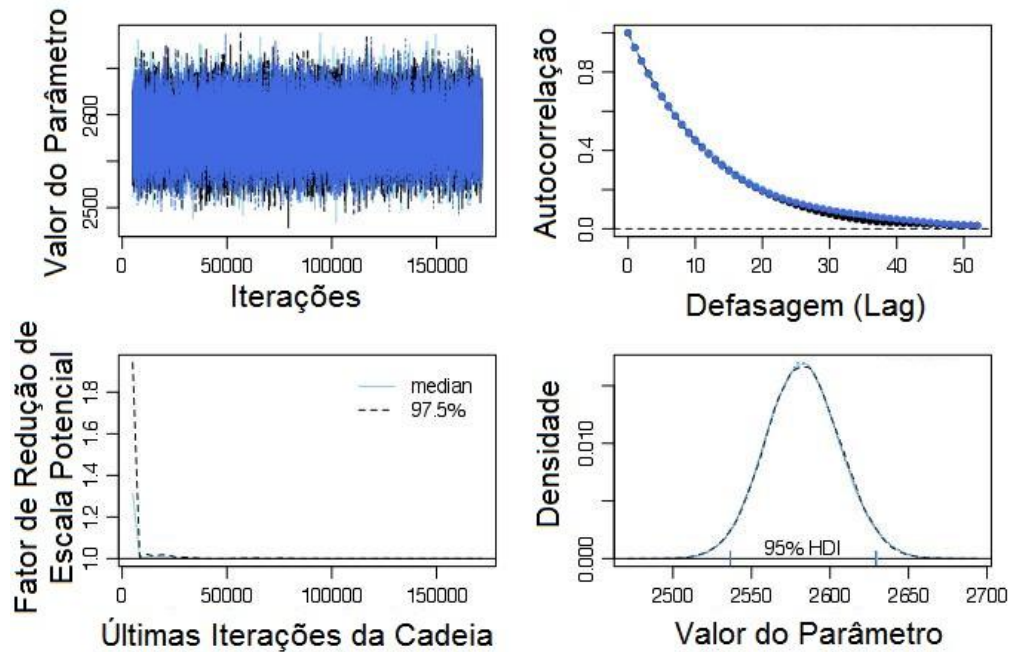
```

dataList      =      list(Ndata      =      Ndata      ,om      =      dataMat$Freq,Tp      =
dataMat$Temp,y1=log(dataMat$modulo),y2=log(dataMat$mimaginario),
      y3=log(sqrt(dataMat$mimaginario^2+dataMat$modulo^2)))
      save(Dados,dataList,Parametros,codaSamples,file='reamostragem_codasamples_modelo_
_Arrhenius.Rda')
}

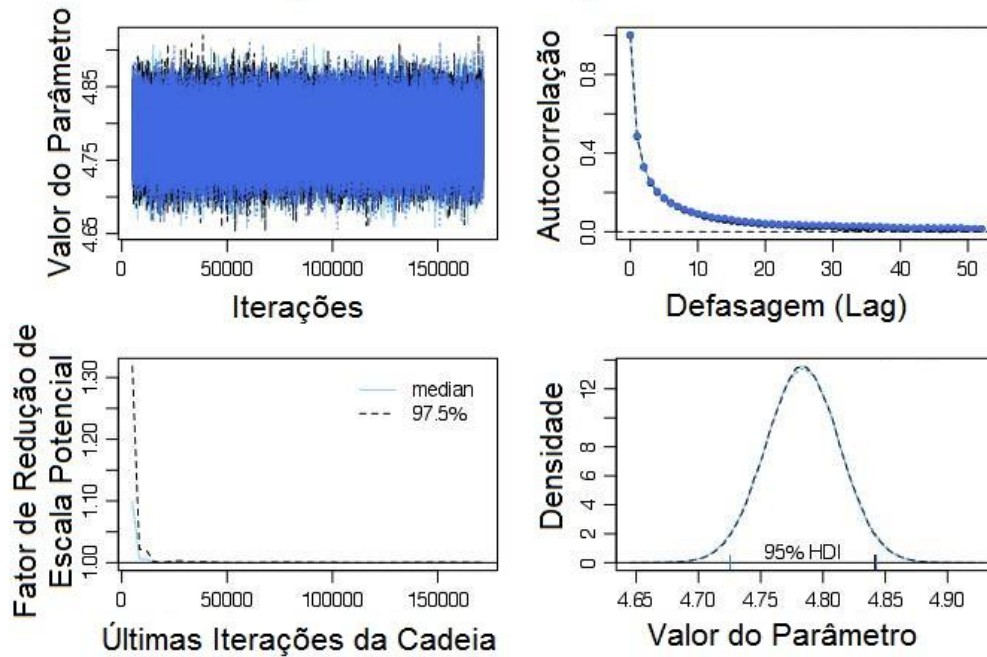
```

APÊNDICE B – DIAGNÓSTICOS DE CONVERGÊNCIA PARA AS SIMULAÇÕES MCMC UTILIZANDO A EQUAÇÃO WLF

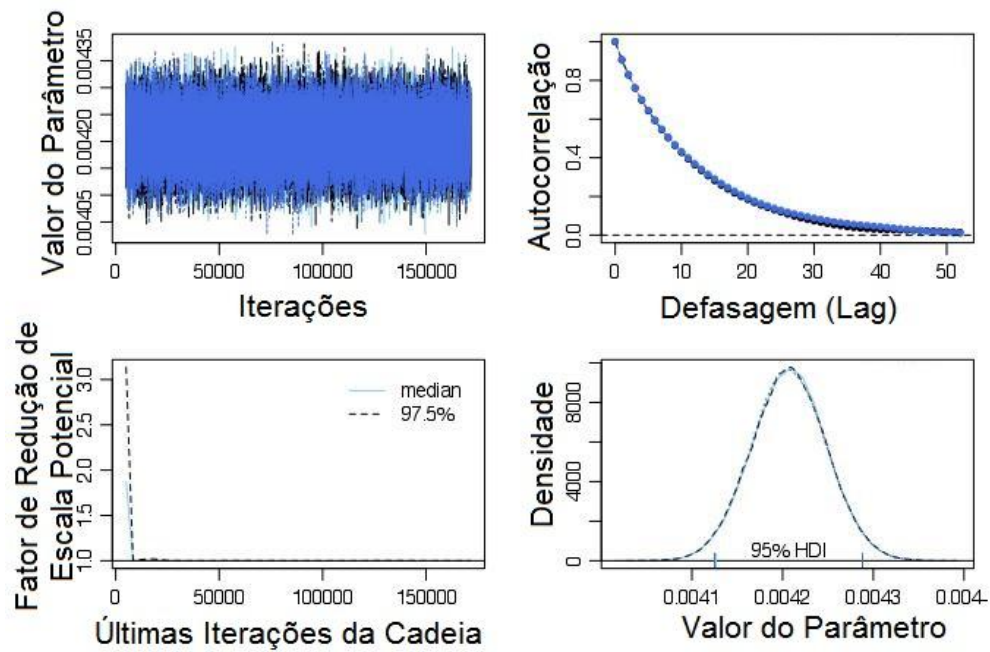
Diagnósticos de Convergência do Parâmetro Eh



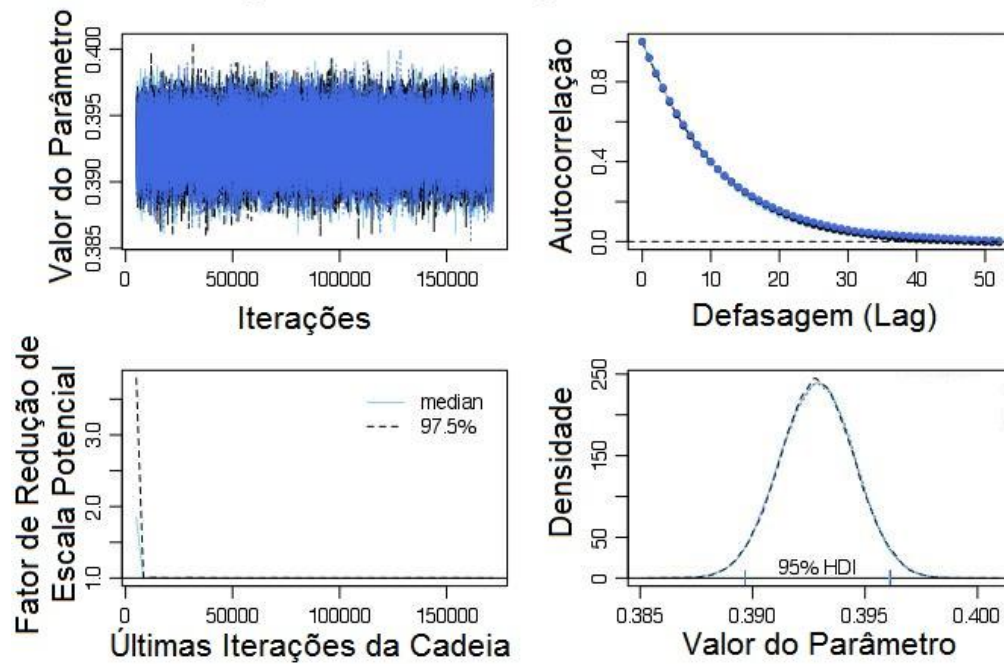
Diagnósticos de Convergência do Parâmetro Ei



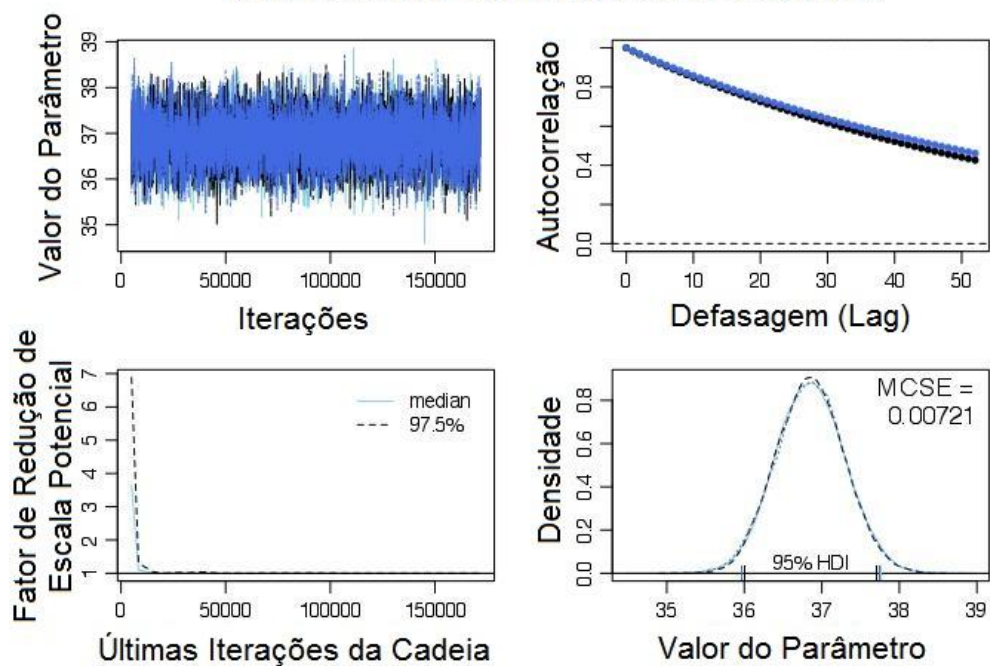
Diagnósticos de Convergência do Parâmetro b



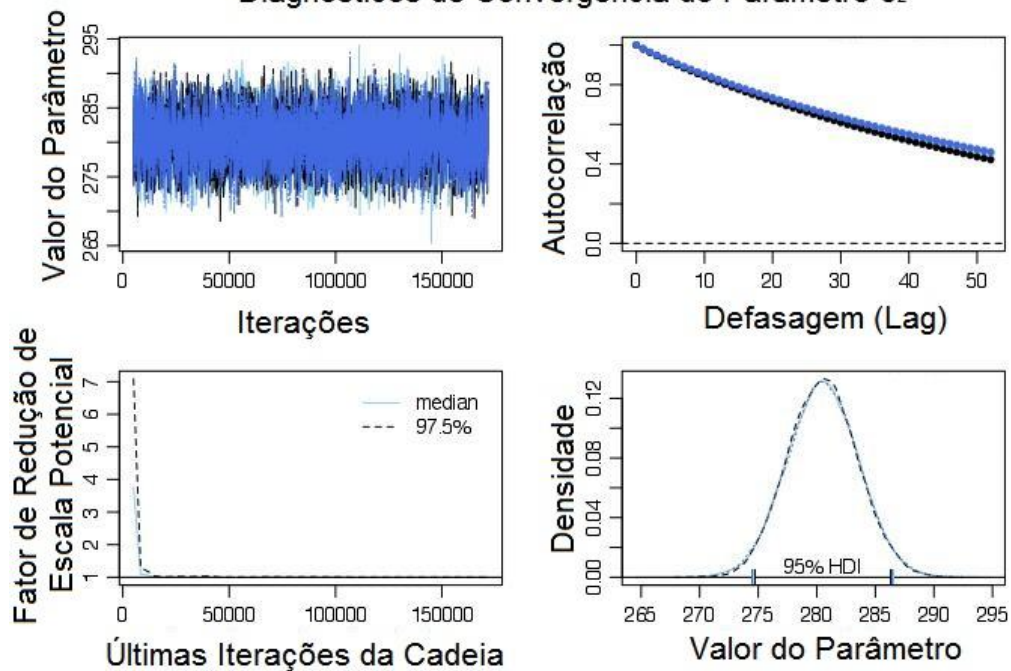
Diagnósticos de Convergência do Parâmetro beta



Diagnósticos de Convergência do Parâmetro θ_1

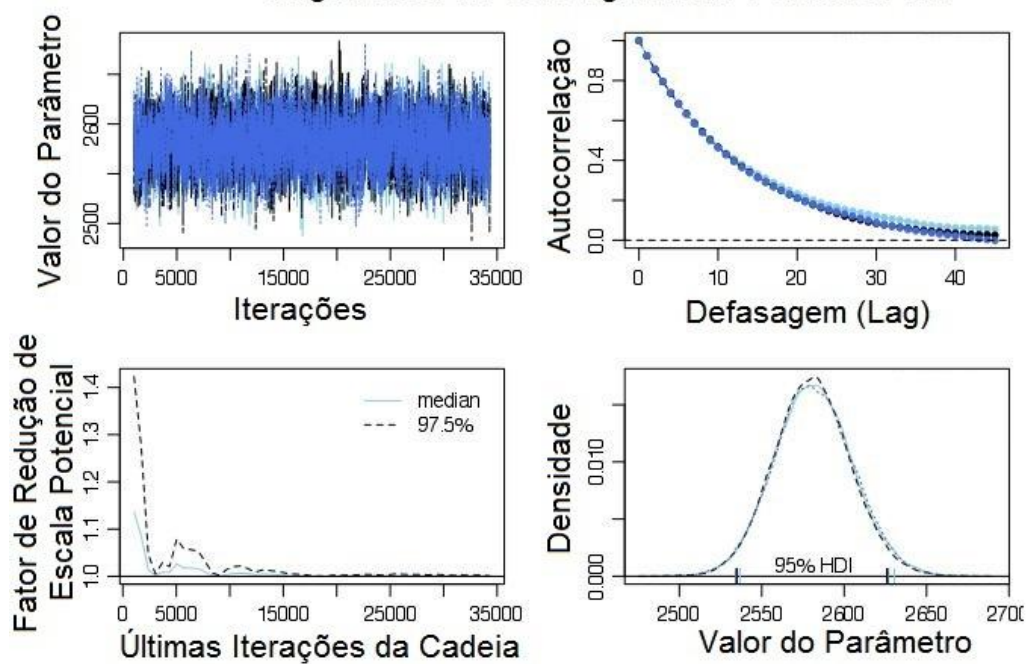


Diagnósticos de Convergência do Parâmetro θ_2

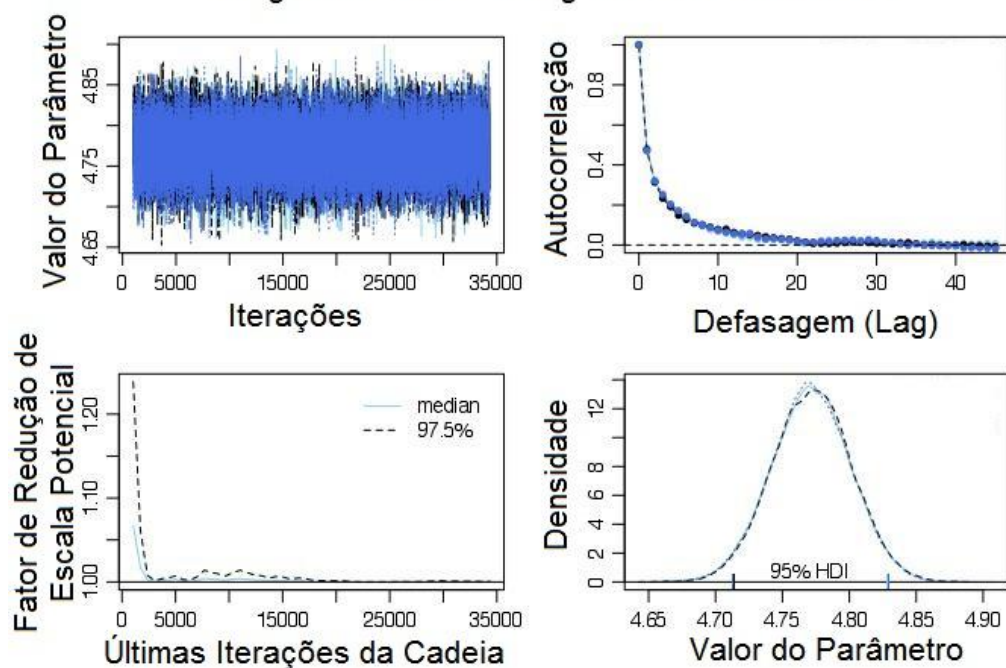


APÊNDICE C – DIAGNÓSTICOS DE CONVERGÊNCIA PARA AS SIMULAÇÕES MCMC UTILIZANDO A EQUAÇÃO DE ARRHENIUS

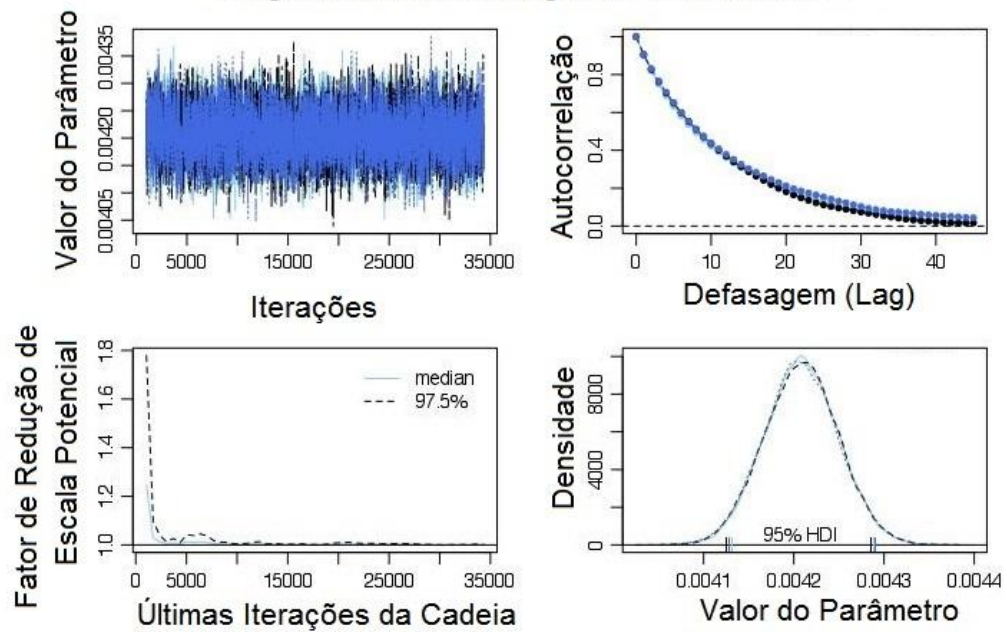
Diagnósticos de Convergência do Parâmetro E_h



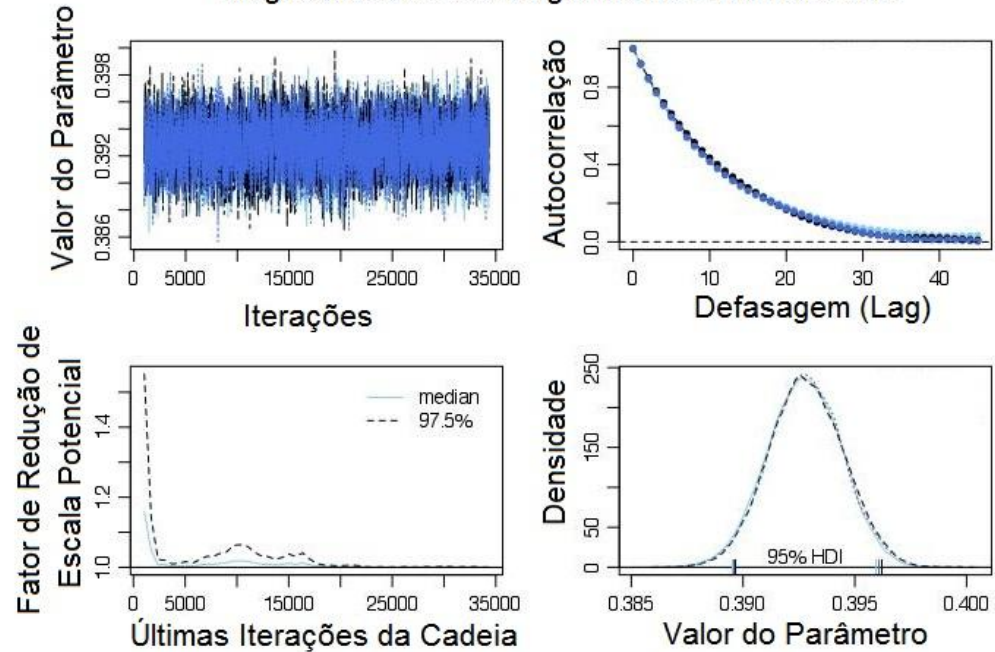
Diagnósticos de Convergência do Parâmetro E_i



Diagnósticos de Convergência do Parâmetro b



Diagnósticos de Convergência do Parâmetro β



Diagnósticos de Convergência do Parâmetro T_A 